

Различные СТМ-изображения сверхструктуры чистой грани Si(133)-6 × 2

(Памяти научного руководителя Б.З. Ольшанецкого посвящается)

С. А. Тийс¹⁾

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 24 января 2017 г.

После переработки 10 февраля 2017 г.

Методом сканирующей туннельной микроскопии получены новые детальные изображения сверхструктуры атомарно-чистой поверхности Si(133)-6 × 2. Проанализированы сходства и отличия ранее опубликованных изображений. Предложена новая атомная модель элементарной ячейки сверхструктуры поверхности Si(133)-6 × 2 на основе подробностей новых изображений и противоречий ранее предложенных моделей.

DOI: 10.7868/S0370274X1708001X

Впервые грань Si(133) была упомянута как стабильная поверхность с собственной поверхностной структурой 13×1 в работе Б.З. Ольшанецкого с соавторами [1] в рамках исследования высокоиндексных поверхностей кремния методом дифракции медленных электронов. Через некоторое время на вицинальных поверхностях Si(111), отклоненных в сторону плоскости {011} или в направлении типа $\langle 11\bar{2} \rangle$, был обнаружен эффект огранки группы ступеней высотой в один бислой именно фасетками (133) [2, 3]. Вслед за этим появились первые СТМ-изображения грани (133) [4–8], а также сообщения о наблюдении на ней разнообразных поверхностных структур: 6×3 , 13×1 , 12×1 . Как выяснилось позднее, часть поверхностных структур обязана наличию неконтролируемой примеси никеля на поверхности Si(133) [9].

Неперестроенную чистую поверхность Si(133) можно представить в виде чередующихся микрограней (111) и (011), вытянутых вдоль направления $[0\bar{1}1]$ (рис. 1).

В литературе можно встретить два обозначения поверхностной структуры атомарно-чистой поверхности Si(133): 12×1 и 6×2 . Однако оба эти обозначения некорректны, поскольку вектора ячеек сверхструктур не совпадают по направлению с единичными векторами примитивной ячейки неперестроенной поверхности Si(133)- 1×1 . Например, для структуры 6×2 вектор \mathbf{V} не совпадает по направлению с единичным вектором \mathbf{b} (см. рис. 1а). Корректное обозначение перестроенной поверхности возможно только в матричной форме [10, 11] (см. рис. 1а), но оно гро-

моздко при упоминании в тексте. Компактную запись в виде 6×2 проще использовать при обсуждении структуры чистой поверхности Si(133) в публикациях.

Появление СТМ-изображений чистой поверхности Si(133) высокого разрешения позволило Ольшанецкому с соавторами [10] предложить первую модель расположения атомов в элементарной ячейке поверхностной структуры Si(133)- 6×2 . На изображениях в режиме туннелирования электронов из острия в пустые состояния поверхности наблюдались регулярные крестообразные группы из четырех ярких пятен (рис. 2а). Авторы [10] предположили, что яркие пятна связаны с расположением дополнительных атомов Si (адатомов) в разнообразных позициях на исходной неперестроенной поверхности Si(133). На рис. 2а черной стрелкой показан единичный элемент из пяти ярких пятен. Такие элементы в форме пентагона наблюдались редко и, как правило, вблизи вакансионных дефектов поверхности [10].

Вторая атомная модель, предложенная автором Гай с сотрудниками [12], была основана на других, не похожих СТМ-изображениях грани Si(133)- 6×2 (см. рис. 2б, который адаптирован с разрешения авторов работы [12], авторское право (2016) Американского физического общества). В работе [12] СТМ-изображения были получены при туннелировании электронов из острия как в пустые состояния поверхности, так и обратно из заполненных состояний поверхности на острие (при положительном и отрицательном напряжении на образце соответственно). Причем, смена полярности не приводила к существенному изменению СТМ-изображения [12]. На

¹⁾e-mail: teys@isp.nsc.ru

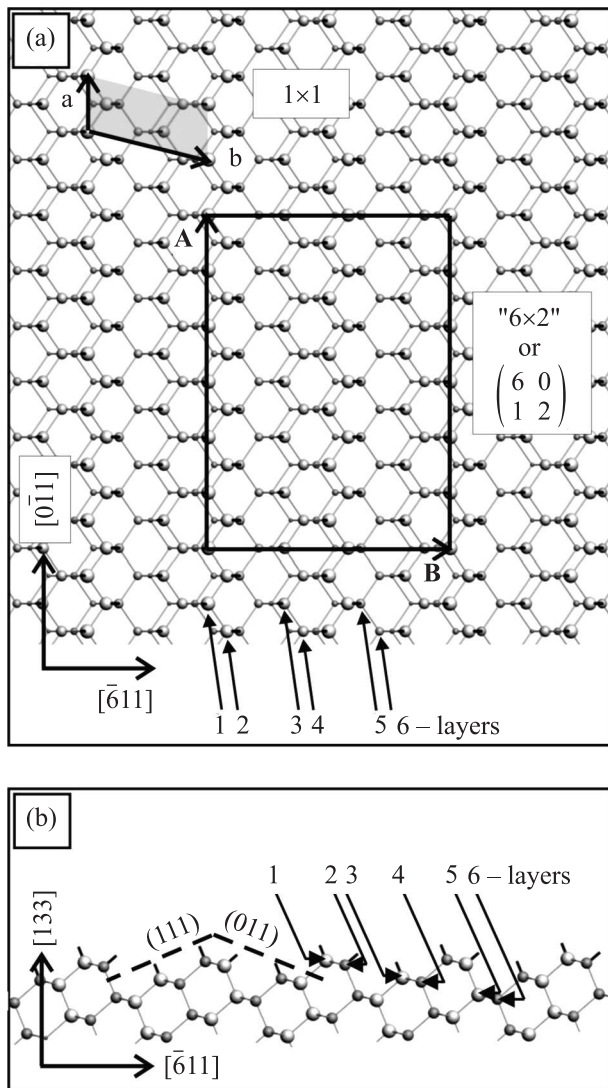


Рис. 1. Расположение атомов на чистой неперестроенной поверхности Si(133). (a) – Вид сверху на поверхность (133); примитивная ячейка 1×1 выделена темным цветом и обозначена векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} ; ячейка 6×2 – векторами \mathbf{A} и \mathbf{B} . (b) – Поперечное сечение поверхности Si(133) вдоль направления $[\bar{6}11]$; пунктирными линиями показаны чередующиеся участки микрограней (111) и (011). Цифрами 1–6 и стрелками показаны атомы на разных уровнях, начиная от поверхности

них различались периодически расположенные группы из пяти ярких пятен, выделенные прямоугольной пунктирной рамкой на рис. 2b. Кроме того, вдоль направления $[\bar{6}11]$ на изображениях наблюдались относительно глубокие “канавки” (темные полосы вдоль направления $[\bar{6}11]$).

Третья атомная модель Баттаглия [13], была основана на новых отличающихся СТМ-изображениях (см. рис. 2с, который адаптирован с разрешения ав-

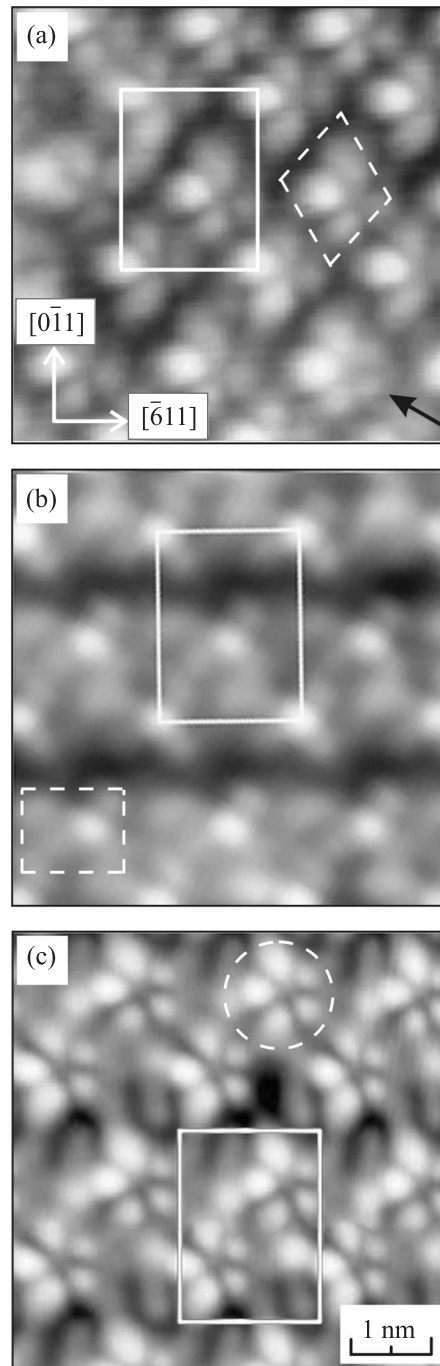


Рис. 2. СТМ-изображения, положенные в основу трех атомных моделей элементарной ячейки поверхности Si(133)- 6×2 и полученные разными авторами при туннелировании электронов в незаполненные состояния кремния: (a) – $[10]$, $U = +1.9$ В; (b) – $[12]$, $U = +0.4$ В; (c) – $[11]$, $U = +2.0$ В. На всех изображениях размер ячейки 6×2 обозначен белым прямоугольником; пунктирными контурами обведены периодически повторяющиеся группы ярких пятен; на рис. (a) черная стрелка указывает на одиночный элемент из пяти ярких пятен

торов работы [11], авторское право (2016) Американского физического общества). Изображения записывались при температуре 77 К после медленного охлаждения образца (несколько часов), на них хорошо видны регулярно расположенные элементы из пяти ярких пятен в форме пентагона (пунктирный круг). Подобные одиночные пентагоны иногда наблюдались на изображениях первой модели авторов [10]. Вдоль направления $[\bar{6}11]$ так же, как у авторов второй модели, просматриваются глубокие “канавки” между парами сближенных пентагонов. Гипотетическое существование микрограней (111) и (011) на перестроенной поверхности (133) (см. рис. 1b) позволило авторам [11, 13] предположить присутствие на ней структурного элемента поверхности $\{011\}$ – пентамера (далее **P**) в пунктирном круге на рис. 2с. Подобные **P** были продемонстрированы с помощью СТМ в работе [14] на поверхности Si(011)-16 × 2 при разных направлениях тока в туннельном промежутке. По мнению авторов [14], основу **P** составляли пять атомов в виде пентагона, соединенных между собой в плоскости поверхности и замкнутые на нижележащий углубленный шестой атом. Стабильность и энергия такого компактного **P** для грани (011) была рассчитана ab initio в работе Стекольников [15]. Необходимо отметить, что впервые подобный **P** на основе заглубленного междоузельного атома был предложен Дабровски с соавторами [16] как элемент поверхностной структуры 3 × 2 на грани Si(113).

Цель данной работы – установить наиболее достоверное СТМ-изображение поверхности Si(133)-6 × 2 при разных полярностях напряжения и предложить уточненную атомную модель элементарной ячейки 6 × 2, соответствующую реальным СТМ-изображениям чистой поверхности Si(133).

Получение атомарно-чистой поверхности Si(133)-6 × 2 происходило в условиях сверхвысокого вакуума в установке СТМ производства OMICRON (Германия). Образцы кремния размером 12 × 3 × 0.4 мм вырезались из кремниевых шайб р-типа с сопротивлением 5 Ом×см. Отклонение поверхности от плоскости (133) не превышало полградуса. Перед установкой в камеру СТМ образцы обрабатывались в водном растворе смеси азотной кислоты и перекиси водорода для формирования тонкого защитного окисла. Его последующее испарение в вакууме приводило к очистке поверхности. В вакуумной камере образцы сначала обезгаживали не менее 4 ч при температуре около 600 °С, затем поверхность кремния очищалась несколько секунд прогревом 1250 °С при давлении не более 2 × 10⁻¹⁰ торр. Образец прогревался прямым пропуском тока. Калибровку температуры

образца проводили с помощью оптического пирометра, охлаждали образец ступенчатым понижением тока накала со скоростями от 0.2 °С/мин до 50 °С/мин в диапазоне температур 850–400 °С.

Записывали СТМ-изображения поверхности при комнатной температуре. Для всех СТМ-изображений светлые участки на рисунках соответствуют выступающим частям рельефа поверхности, а темная расцветка – углублениям. В качестве СТМ-зонда использовали вольфрамовые иглы, полученные электролитическим травлением в 2М-растворе NaOH. Анализ и обработку СТМ-изображений проводили с помощью свободно распространяемого программного обеспечения WSxM 4.0 [17, 18]. Для моделирования кристаллической решетки применяли программу Gdis [19].

Экспериментальные СТМ-изображения при разной полярности, полученные в данной работе, существенно отличаются друг от друга и одновременно проясняют разнообразие ранее опубликованных изображений (см. рис. 2), положенных в основу разных атомных моделей поверхности Si(133)-6 × 2 [10, 12, 13].

Получение устойчивых СТМ-изображений поверхности Si(133)-6 × 2 (рис. 3а) при туннелировании электронов из заполненных состояний полупроводника оказалось непростой задачей. При отрицательном напряжении на образце СТМ-изображения надежно фиксировались в достаточно узком диапазоне рабочих напряжений (от –0.4 до –0.8 В). Повышение или понижение напряжения приводило к потере приемлемого атомного разрешения из-за перескоков атомов Si. Не исключено, что по этой причине авторы первой [10] и третьей [13] моделей не привели СТМ-изображения при отрицательном напряжении на образце.

На характерном СТМ-изображении (см. рис. 3а) при отрицательном напряжении на образце хорошо видны повторяющиеся элементы в виде пяти ярких пятен, расположенные в форме прямоугольника, подобно изображениям из работы [12] (см. рис. 1b). Пары сближенных элементов вдоль направления $[0\bar{1}1]$ разделены глубокими “канавками” вдоль направления $[\bar{6}11]$. Необходимо заметить, что на перестроенной поверхности (133) “канавки” должны располагаться вертикально (см. рис. 1а) и вдоль направления $[0\bar{1}1]$, а на реальной перестроенной поверхности “канавки” наблюдаются в перпендикулярном направлении $[\bar{6}11]$, также как в работах [12, 13]. Следовательно, исходные ряды перестроенной поверхности (133) существенно изменены за счет перераспределения или добавления атомов.

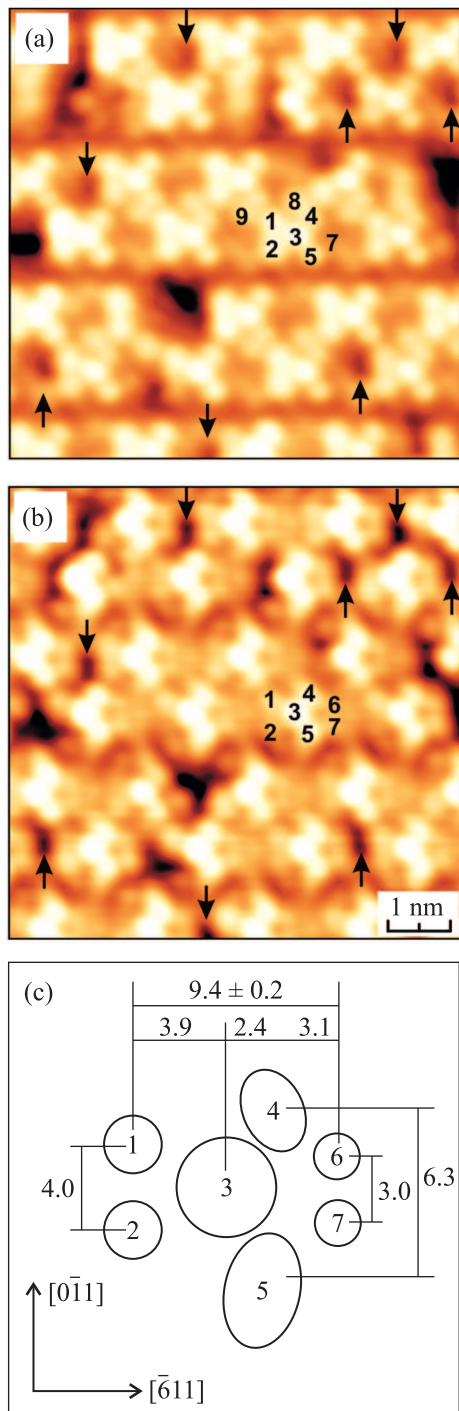


Рис. 3. (Цветной онлайн) Типичные изображения СТМ чистой поверхности Si(133)- 6×2 при противоположных напряжениях на образце: (а) – $U = -0.8$ В и (б) – $U = +0.8$ В. Стрелками показаны характерные вакансионные дефекты – **D**. (с) – Схема расположения наиболее ярких элементов поверхности, обозначенные цифрами на изображениях (а) и (б)

При положительном напряжении на образце (от $+0.2$ до $+2.1$ В) (см. рис. 3б) СТМ-изображения по-

верхности Si(133) отличаются от изображений работы [12], но соответствуют изображениям авторов третьей модели (см. рис. 2с) [13]. Ассиметричный пентагон с удлинённым элементом со стороны “канавки” является основным структурным элементом поверхности, как следует из рис. 3б.

На СТМ-изображениях (см. рис. 3а, б) цифрами обозначены основные элементы пентагона (3–7) и его окружения (1, 2, 8, 9). На рис. 3с схематично изображены наиболее яркие элементы из двух СТМ-изображений, полученных при противоположных напряжениях на образце (см. рис. 3а, б). На схеме также указаны расстояния между основными элементами изображений, измеренные с точностью ± 0.02 нм. Стрелками на рис. 3а, б показаны часто встречающиеся вакансионные дефекты – **D**.

Элементы пентагона 3, 4, 5 всегда наблюдаются на СТМ-изображениях, независимо от полярности рабочего напряжения, причем элемент 3 – самый яркий, явно выступающий над поверхностью. Элементы 6 и 7 видны в составе пентагона на изображениях при положительном напряжении на образце (см. рис. 3б), в то время как элемент 7 еле заметен, а 6 совсем не виден при отрицательном напряжении на образце (см. рис. 3а). Также на рис. 3а можно различить гораздо больше изолированных светлых пятен. Возможно, это связано с проявлением заглубленных атомов с оборванными связями, подобно появлению рест-атомов на СТМ-изображениях структуры Si(111)- 7×7 при низких отрицательных напряжениях на образце [20].

Более контрастные изображения элементов 6 и 7 наблюдаются на рис. 3б рядом с вакансионным дефектом **D**, что может свидетельствовать об углубленном положении этой пары атомов пентагона. При сканировании поверхности относительно тупым острием можно либо не разрешить нижележащую пару атомов 6, 7, либо не зафиксировать ее совсем в случае расположения атомов пентагона 6, 7 ниже группы атомов 3–5. Не исключено, что по этой причине авторы первой модели визуализировали только крестообразные объекты (см. рис. 2а) и не наблюдали глубоких “канавок” на изображениях вдоль направления $[\bar{6}11]$. Изображения пентагонов становились заметными лишь вблизи дефектов вакансионного типа (стрелка на рис. 2а). При этом острие могло опускаться ниже, благодаря наличию углубления в месте расположения **D**. Необходимо отметить, что появление характерной вакансии **D** (стрелки на рис. 3а, б) всегда сопровождается отсутствием пятен 8 или 9 на изображениях СТМ при отрицательной полярности на образце (см. рис. 3а). Пятно 9 отсутствует при рас-

положении **D** ниже пятна, а пятно 8 исчезает при расположении **D** выше пятна. Вероятнее всего дефект **D** связан с удалением, по крайней мере, одного атома и перезамыканием оборванных связей в этом месте кристаллической решетки.

Помимо признаков расположения элементов пентагона 3–5 и 6, 7 на разных уровнях, его размеры, наблюдаемые в СТМ, заметно превышают конструкцию **P** Стекольникова [15] с междоузельным атомом под **P**. В представленных экспериментах изображение пентагона в среднем в 1.5 раза больше, а в работе [11] в 1.8 раза больше геометрии **P** Стекольникова. Эти данные позволяют предположить, что наблюдаемый пентагон не эквивалентен **P** на грани Si(011)-16 × 2, как утверждается в третьей модели [11].

По данным работы [14], **P** на грани {011} расположены попарно и развернуты зеркально-симметрично относительно оси $\langle 011 \rangle$, с небольшим сдвигом вдоль этой оси. Наличие ступени на плоскости (133) приводит к уширению именно фасетки (011) до размера, где могут поместиться два **P**. Увеличение площади микрограни (011) видно при сравнении сечений решеток на рис. 1b и 4b (пунктирная линия). Необходимо заметить, что на наших новых СТМ-изображениях пентагоны ориентированы одинаково относительно оси $[0\bar{1}1]$, выше и ниже ступени (см. рис. 4a). Черными кружками на рис. 4a отмечены положения ярких пятен, составляющих пентагоны, направление $[0\bar{1}1]$ развернуто под небольшим углом из-за искажения СТМ-изображения за счет дрейфа в процессе записи. Экспериментальный факт различной ориентации наблюдаемых пентагонов на гранях {133} и {011} также может свидетельствовать о разной атомной конфигурации элементов из пяти ярких пятен (пентагов и **P**) на этих поверхностях.

Элементарная ячейка поверхностной структуры Si(133)-6 × 2 имеет относительно большой размер и может быть представлена значительным числом вариантов расположения атомов в ней. Следовательно, необходимо подобрать атомную модель, учитывающую максимальное количество наблюдаемых деталей экспериментальных СТМ-изображений.

Наблюдение “канавок” вдоль направления $[\bar{6}11]$ на фоне возвышающихся пентагонов свидетельствует о наличии на поверхности избыточных атомов, добавленных к исходной неперестроенной поверхности (133), иначе просматривались бы вертикальные ряды атомов вдоль направления $[0\bar{1}1]$.

О добавлении атомов на неперестроенную поверхность (133) свидетельствует и массоперенос, сопровождающий огранку групп ступеней фасетками

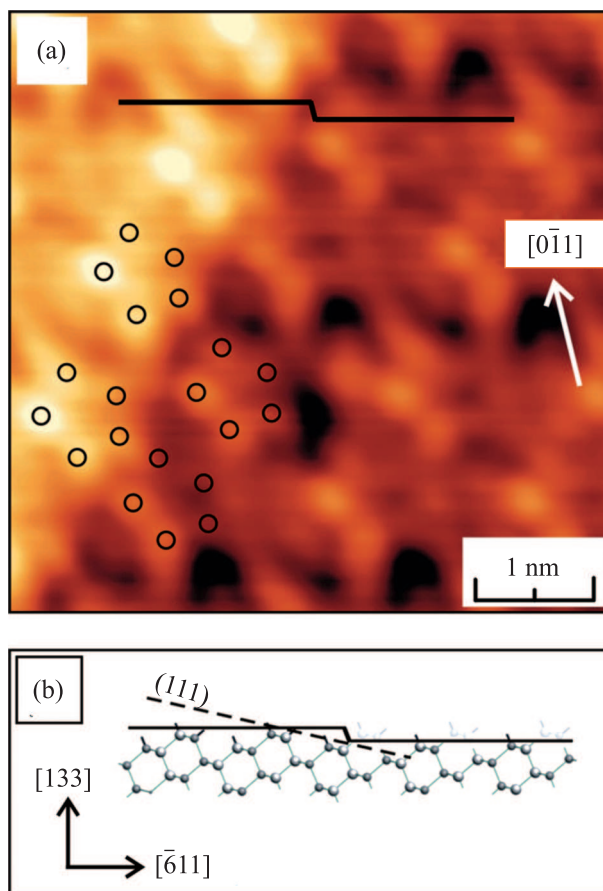


Рис. 4. (Цветной онлайн) Ступень на поверхности Si(133). (a) – СТМ-изображение при $U = +0.6$ В, линия-ступенька в верхней части показывает перепад высоты, черными кружками отмечены положения ярких пятен. (b) – Поперечное сечение подложки Si(133) вдоль направления $[\bar{6}11]$

(133) [2, 3] на вицинальной поверхности (111). При температурах выше 850 °С вицинальные поверхности Si(111) с отклонением в несколько градусов от плоскости (111) в сторону граней {011}, представляют собой систему равномерно расположенных ступеней. В результате охлаждения такой поверхности ниже температуры 800 °С, ступени собираются в компактные группы (эшелоны ступеней), разделенные широкими террасами (111) [21]. Дальнейшее медленное снижение температуры (0.2 °С/с) в диапазоне 800–500 °С приводит к постепенному увеличению угла наклона ступенчатых участков поверхности вплоть до 22° [2]. Так происходит формирование микрограней (133) вместо групп ступеней на вицинальной поверхности. Процессы испарения и конденсации атомов Si на последнем этапе охлаждения (около 600 °С) пренебрежимо малы, а перемещение атомов по поверхности продолжается. Следовательно, для постепен-

ного увеличения угла наклона участка поверхности со ступенями часть атомов должна переместиться от нижних к верхним ступеням. Вероятнее всего, массоперенос происходит посредством поверхностной диффузии атомов Si по упорядоченным террасам Si(111)- 7×7 от нижних ступеней вышележащей группы к верхним ступеням нижележащей группы ступеней. Таким образом, элементарная ячейка поверхностной структуры Si(133)- 6×2 должна содержать избыточные атомы по сравнению с неперестроенной поверхностью.

В новой модели необходимо учесть, что удаление, по крайней мере, одного атома при формировании часто повторяющегося дефекта **D** не нарушает конфигурацию пентамера и его видимого окружения. Также следует проанализировать изображения пентамеров, примыкающих сверху и снизу к ступени (см. рис. 4).

Предлагаемая атомная модель элементарной ячейки поверхностной структуры Si(133)- 6×2 , построенная на основе полученных СТМ-изображений, записанных при разной полярности, представлена на рис. 5. Атомы с оборванными связями изображены в виде сфер увеличенного размера. Темным цветом (красным – online) выделены атомы, добавленные на исходную неперестроенную поверхность. Пунктирной линией изображен контур элементарной ячейки Si(133)- 6×2 . Кружками и овалами показано расположение характерных элементов поверхности, приведенных на схеме рис. 3с.

В левой части рис. 5а (отмечено как **D**) показана предполагаемая конфигурация вакансионного дефекта **D**. В такой конфигурации дефекта видимые пентамеры на СТМ-изображениях не изменяются. Продолговатая форма **D** (стрелки на рис. 3а, б), вероятнее всего, связана с отсутствием сразу двух атомов (отмечены крестами на рис. 5а). Удаление двух атомов на месте **D** приводит к образованию пяти атомов (обведены точечными контурами на рис. 5а) с семью оборванными связями вместо трех связей до удаления. Часть избыточных оборванных связей должна перезамкнуться между собой. Удаление атома, связанного с пятном 8 на рис. 3а, вероятнее всего, приводит к образованию пентамерного звена в нижней части **D** за счет замыкания связей двух нижних атомов в точечных контурах. Другая пара атомов в точечных контурах справа от **D** образует другой димер-пентамер с одной оборванной связью. Оставшиеся атомы с оборванными связями располагаются ниже уровня удаленных атомов и могут не визуализироваться на СТМ-изображениях. Такая предлагаемая конфигурация дефекта не увеличивает количе-

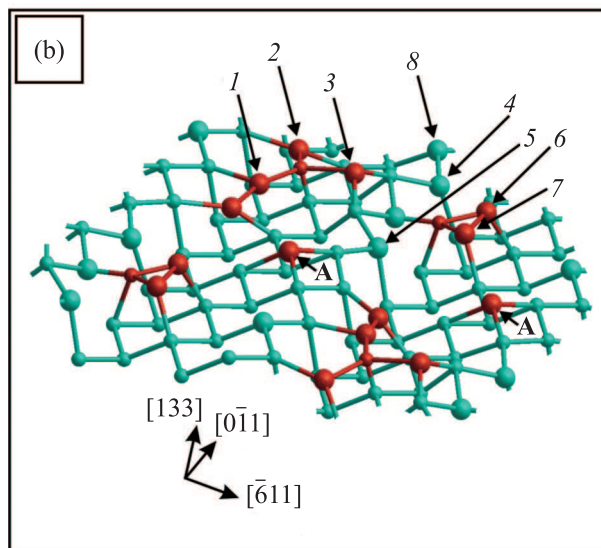
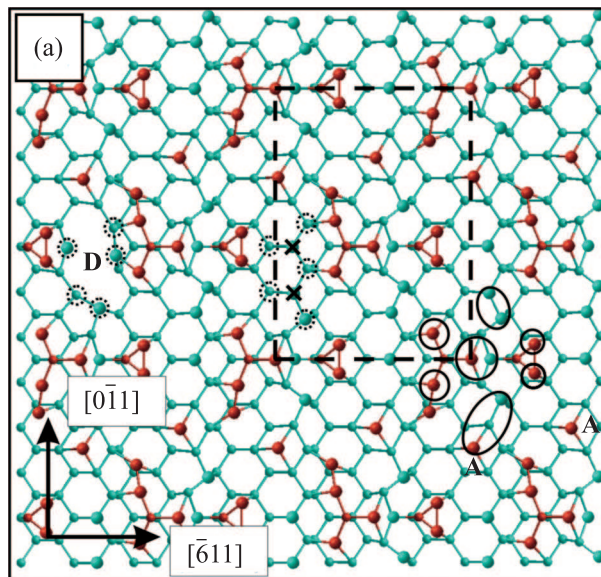


Рис. 5. (Цветной онлайн) Атомная модель поверхностной структуры Si(133)- 6×2 ; темные (красные) атомы добавлены к неперестроенной поверхности; атомы с оборванной связью изображены большим размером; буквами **A** обозначены дополнительные атомы в “канавках”. (а) – Вид сверху на поверхность Si(133); пунктирной линией показан размер элементарной ячейки 6×2 , кружками и овалами – расположение основных элементов поверхности, соответствующих рис. 3с; отмеченные крестами атомы удаляются при формировании дефекта **D** (положение вакансионного дефекта); атомы, обведенные точечными контурами, участвуют в формировании **D**. (б) – Трехмерное изображение фрагмента перестроенной поверхности; цифрами и стрелками показано расположение основных элементов поверхности, соответствующих рис. 3с

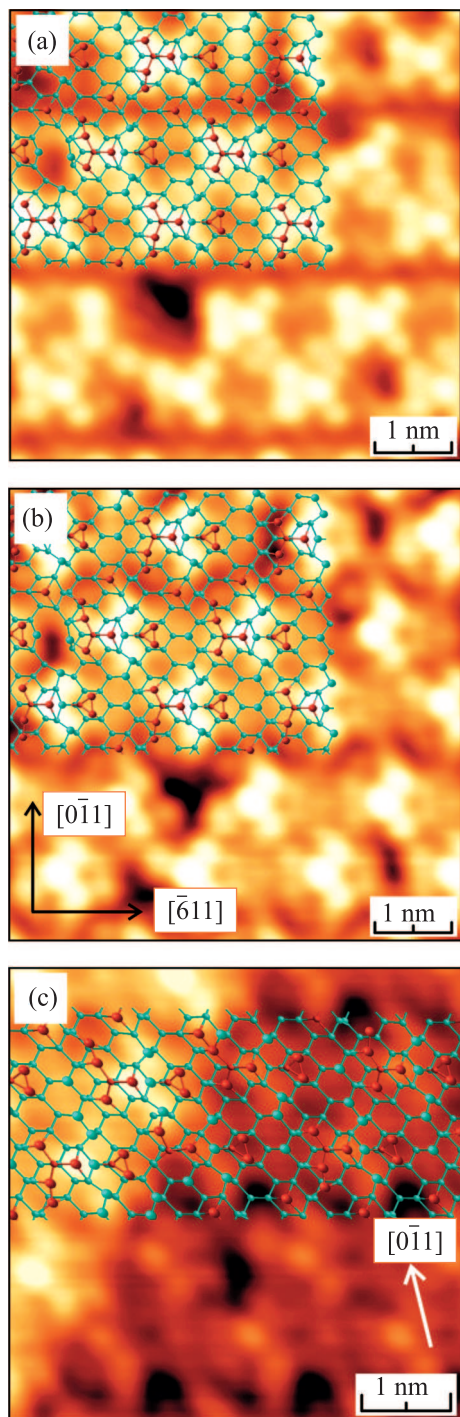


Рис. 6. (Цветной онлайн) Наложение решетки атомной модели на СТМ-изображения поверхности Si(133)-6 × 2. (a) – $U = -0.8$ В, (b) – $U = +0.8$ В. (c) – Изображение ступени при $U = +0.6$ В. Темные (красные) атомы добавлены к неперестроенной поверхности; атомы с оборванной связью показаны увеличенным размером

ства атомов с оборванными связями и не изменяет положения основных элементов поверхности.

На трехмерном изображении перестроенной поверхности Si(133)-6 × 2 (см. рис. 5b) стрелками и цифрами обозначены основные элементы пентагона, наблюдаемые в СТМ и соответствующие схеме рис. 3с. Пентагон в модели состоит из двух групп атомов 3–5 и 6–7, что и объясняет его увеличенные размеры на СТМ-изображениях. Атомы 6, 7 с оборванными связями являются элементами тримера. Третий атом тримера приподнимает атомы верхнего слоя и не имеет оборванных связей. Приподнимание верхнего слоя приводит к сближению атомов 4 и 5 в направлении $[0\bar{1}1]$ и фиксации атома 3 на максимальной высоте.

В “канавках” периодически располагаются добавочные атомы **A** в позиции H_3 , замыкающие по три ненасыщенные связи. Вытянутая форма пятен 4 и 5 на СТМ-изображениях (см. рис. 3), вероятнее всего, связана с недостаточным разрешением близко расположенных пар атомов с оборванными связями (4, 8) и (5, **A**).

Предложенная модель поверхности сокращает количество оборванных связей с 36 до 24 и достаточно хорошо коррелирует с СТМ-изображениями. На рис. 6 представлено наложение атомной решетки модели на СТМ-изображения. Наиболее яркие максимумы изображений соответствуют атомам с оборванными связями. В левой части рис. 6а, b показано расположение атомов в области дефекта **D**. На рис. 6с показано наложение атомной решетки на изображение ступени. Искажение решетки и небольшой наклон направления $[0\bar{1}1]$ связан с искажением СТМ-изображения из-за дрейфа в процессе записи.

Основные итоги работы в следующем. Получены новые детальные СТМ-изображения при разных полярностях напряжения в туннельном промежутке. Изображения имеют отличия от ранее опубликованных работ и, в то же время, позволяют объяснить их общие особенности. На основе СТМ-изображений, предложена новая атомная модель элементарной ячейки поверхности Si(133)-6 × 2. Такая перестройка поверхности на треть сокращает количество оборванных связей по сравнению с неперестроенной поверхностью. Модель позволяет объяснить увеличенный размер наблюдаемого в СТМ пентамера, вид и расположение пентамеров ниже и выше ступени, а также независимость изображения пентамера от наличия, или присутствия, характерного вакансионного дефекта **D**.

1. B. Z. Olshanetsky and V. I. Mashanov, Surf. Sci. **111**, 414 (1981).

2. B. Z. Olshanetsky and S. A. Teys, Surf. Sci. **230**, 184 (1990).
3. H. Hibino, Y. Shinoda, Y. Kobayashi, and K. Sugii, Jap. J. Appl. Phys. **30**, 1337 (1991).
4. H. Tanaka, Y. Watanabe, and I. Sumita, Appl. Surf. Sci. **60/61**, 474 (1992).
5. H. Hibino, T. Fukuda, M. Suzuki, Y. Homma, T. Sato, M. Iwatsuki, K. Miki, and H. Tokumoto, Phys. Rev. B **47**, 13027 (1993).
6. H. Tanaka, T. Yokoyama, and I. Sumita, Appl. Surf. Sci. **76/77**, 340 (1994).
7. T. Yokoyama, T. Yokotsuka, I. Sumita, and M. Nakajima, Surf. Sci. **357–358**, 855 (1996).
8. T. Kampschulte, G. Wilhelmi, and H. Neddermeyer, Surf. Sci. **357–358**, 949 (1996).
9. B. Z. Olshanetsky, A. E. Solovyov, A. E. Dolbak, and A. A. Maslov, Surf. Sci. **306**, 327 (1994).
10. B. Z. Olshanetsky, S. A. Teys, and I. G. Kozhemyako, Phys. Low-Dimen. Struct. **11/12**, 85 (1998).
11. C. Battaglia, K. Gaa-Nagy, C. Monney, C. Didiot, E. F. Schwier, M. G. Garnier, G. Onida, and P. Aebi, Phys. Rev. Let. **102**, 066102 (2009).
12. Z. Gai, R. G. Zhao, T. Sakurai, and W. S. Yang, Phys. Rev. B **63**, 085301 (2001).
13. C. Battaglia, G. Onida, K. Gaa-Nagy, and P. Aebi, Phys. Rev. B **80**, 214102 (2009).
14. T. An, M. Yoshimura, I. Ono, and K. Ueda, Phys. Rev. B **60**, 3006 (2000).
15. A. A. Stekolnikov, J. Furthmuller, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **70**, 045305 (2004).
16. J. Dabrowski, H. J. Mussig, and G. Wolff, Phys. Rev. Let. **73**, 1660 (1994).
17. WSXM free software at www.nanotec.es.
18. I. Horcas, R. Fernandez, J. M. Gomez-Rodriguez, J. Colchero, J. Gómez-Herrero, and A. M. Baro, Rev. Scient. Instrum. **78**, 013705 (2007).
19. <http://gdis.sourceforge.net>
20. Y. L. Wang, H.-J. Gao, H. M. Guo, H. W. Liu, I. G. Batyrev, W. E. McMahon, and S. B. Zhang, Phys. Rev. B **70**, 073312 (2004).
21. A. V. Latyshev, A. L. Aseev, A. B. Krasilnikov, and S. I. Stenin, Surf. Sci. **213**, 157 (1989).