

Атомные перестройки и фотоэмиссионные процессы на интерфейсе р-GaN(Cs)-вакуум

В. В. Бакин⁺, С. Н. Косолобов⁺, С. А. Рожков^{+*}, Г. Э. Шайблер^{+*}, А. С. Терехов⁺¹⁾

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

^{*} Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2018 г.

После переработки 4 июля 2018 г.

Впервые изучены спонтанные изменения фотоэмиссионных свойств интерфейса р-GaN(Cs)-вакуум с эффективным отрицательным электронным средством, вызванные перестройками его атомной структуры. Обнаружено оптимальное Cs-покрытие, обеспечивающее как максимальную вероятность выхода фотоэлектронов в вакуум, так и ее стабильность. Предложена термодинамическая модель, объясняющая связи фотоэмиссионных свойств интерфейса р-GaN(Cs)-вакуум с его свободной энергией и энтропией.

DOI: 10.1134/S0370274X18150067

Известно, что адсорбция цезия [1, 2] или цезия и кислорода [3, 4] на атомарно-чистых поверхностях широкозонных полупроводников A_3B_5 с дырочной проводимостью формирует интерфейсы с эффективным отрицательным электронным средством (ОЭС), при котором уровень вакуума (ε_{vac}) оказывается ниже дна зоны проводимости в объеме полупроводника. Полупроводники с ОЭС являются эффективными эмиттерами электронов и широко используются в фотоприемниках для детектирования одиночных фотонов с высоким временным и пространственным разрешением [5], а также для генерации электронных пучков с высокой спиновой поляризацией [6] и узким энергетическим распределением [7, 8]. Полупроводники с ОЭС являются и полезной модельной системой, позволяющей изучать фотоэмиссионным методом важные фотоэлектронные процессы в объеме многослойных гетероструктур [9]. Актуальными областями исследований остаются атомные процессы на ОЭС-интерфейсах [10, 11] и механизмы рассеяния фотоэлектронов [12], определяющие в значительной степени вероятность их выхода в вакуум (P_e). С другой стороны, термодинамические закономерности формирования атомной структуры ОЭС-интерфейсов, определяющие стабильность P_e и ее величину, не изучены до сих пор. Пытаясь понять эти закономерности, мы впервые изучили спонтанные изменения фотоэмиссионных свойств интерфейса р-GaN(Cs)-вакуум с ОЭС, вызванные самопроизвольными перестройками его атомной структуры.

Эксперименты были проведены в достаточно высоком вакууме, в котором адсорбция остаточных газов не влияла на атомную структуру и фотоэмиссионные свойства ОЭС-интерфейса [13]. Интерфейс р-GaN(Cs)-вакуум был выбран как модельный по двум причинам. Во-первых, цезий не образует химических соединений с галлием и азотом. Поэтому адсорбция Cs-атомов на интерфейсе р-GaN(Cs)-вакуум может сопровождаться только двумя самопроизвольными процессами: объединением Cs-атомов в кластеры [14, 15] и десорбцией цезия [16]. Во-вторых, формирование ОЭС-состояния на этом интерфейсе можно изучать без напуска в вакуумную камеру кислорода [4]. Поэтому давления остаточных кислородсодержащих газов в вакуумной камере, изменяющих свойства ОЭС-интерфейса [13], можно снизить до пренебрежимо малого уровня.

В экспериментах использовалась двухслойная р-GaN/AlN-структура, выращенная на подложке из сапфира с ориентацией (0001) методом эпитаксии из металлоорганических соединений. Плотнупакованные шестигранные островки на поверхности изучаемого GaN-слоя указывали на его гексагональную ориентацию. Концентрации магния и свободных дырок в р-GaN-слое были близки к $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Окислы галлия удалялись с поверхности р-GaN-слоя раствором HCl в изопропиловом спирте в герметичной камере с чистым азотом [17]. Затем мы крепили структуру в держатель, устанавливали ее в герметичный транспортный контейнер и переносили в шлюз вакуумной установки в атмосфере чистого азота [18]. После откачки

¹⁾e-mail: terek@isp.nsc.ru

шлюза до давления $\sim 10^{-5}$ Па структура переносилась в вакуумную камеру и крепилась на карусель. Последующий прогрев p-GaN-слоя при температуре $\approx 600^\circ\text{C}$ удалял остаточные загрязнения и формировал Ga-стабилизированную поверхность с реконструкцией (1×1) [17]. Для откачки остаточных газов использовалась комбинация из магниторазрядного насоса НМД-0.4 и самодельного геттерного насоса на основе порошка из Ti-V сплава. Давления H_2O , CO_2 , CO и CH_4 в вакуумной камере не превышали 1×10^{-10} , 1×10^{-10} , 5×10^{-10} и 5×10^{-10} Па соответственно. Нанесение цезия и измерения фотоэмиссионных свойств интерфейса проводились при комнатной температуре. Цезиевое покрытие (θ_{Cs}) мы оценивали по длительности работы Cs-источника. Величину θ_{Cs} , соответствующую максимуму $P_e(\theta_{\text{Cs}})$, мы обозначили как θ_{Cs}^m . Поверхность p-GaN-слоя во время нанесения цезия освещалась модулированным излучением УФ-светодиода с максимумом спектральной яркости при $\hbar\omega \approx 3.5$ эВ, близкой к ширине запрещенной зоны полупроводника, и измерялся полный ток эмитированных фотоэлектронов. Величина $P_e(t)$, пропорциональная полному фототоку [19], измерялась в относительных единицах. Спонтанные изменения $P_e(t)$, обусловленные самопроизвольными перестройками атомной структуры интерфейса p-GaN(Cs)-вакуум, измерялись во время выключений Cs-источника. Причины изменений $P_e(t)$ мы уточняли путем измерений энергетических распределений эмитированных фотоэлектронов ($n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$) во время выключений Cs-источника [20]. Для измерений $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределений использовался фотоэлектронный спектрометр с однородным тормозящим электрическим полем [20, 21], установленный в камере формирования ОЭС-интерфейса. При измерениях $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределений мы также использовали светодиод с $\hbar\omega \approx 3.5$ эВ. Спонтанные изменения $P_e(t)$ во время измерений $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределений были невелики и не вносили существенных искажений в их форму. Величину ε_{vac} интерфейса при данном θ_{Cs} мы определяли как ε_{ion} , при которой производная от $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределения по энергии была максимальна. Положение дна зоны проводимости в объеме p-GaN-слоя (ε_{cb}) определялось путем анализа формы вершины крыла $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределения термализованных фотоэлектронов [12]. Амплитуда $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределения определялась путем его интегрирования и приравнивания полученного результата к средней величине $P_e(t)$ на рис. 1 в соответствующий интервал времени. Эффективное электронное сродство интерфейса (χ^*) рассчитывалось как разность между ε_{cb} и ε_{vac} [22]. Погрешность определения величины

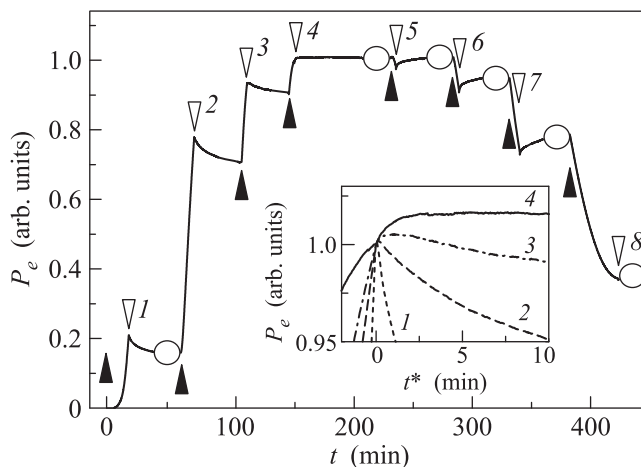


Рис. 1. Вынужденные и спонтанные изменения $P_e(t)$, измеренные во время включений (темные треугольники) и выключений (светлые нумерованные треугольники) Cs-источника, соответственно. Кружками указаны моменты измерений $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределений

χ^* в большинстве наших экспериментов была близка к ± 0.02 эВ. Погрешность определения величины изменения χ^* после 1-го выключения Cs-источника не превышала по нашим оценкам ± 0.002 эВ.

На рисунке 1 показаны вынужденные и спонтанные изменения $P_e(t)$, измеренные во время нанесения цезия на поверхность p-GaN-слоя и во время выключений Cs-источника соответственно. Включения Cs-источника обозначены на рис. 1 темными треугольниками, а его последующие выключения – нумерованными светлыми. Окружностями на рис. 1 обозначены области измерений $n_e(\varepsilon_{\text{ion}})$ -распределений. Из рисунка 1 следует, что первые три включения Cs-источника вызывали вынужденные увеличения $P_e(t)$, а после последующих выключений Cs-источника $P_e(t)$ спонтанно уменьшалась. Четвертое включение Cs-источника также увеличило $P_e(t)$, но после прерывания Cs-потока $P_e(t)$ продолжала спонтанно увеличиваться в течение ≈ 5 мин, а затем заметные изменения $P_e(t)$ прекратились. Измерение $P_e(t)$ в максимуме продолжалось в течение 50 мин и оказалось, что относительная величина ее остаточных изменений не превышает 3×10^{-3} и близка к погрешности наших измерений. Для уточнения деталей формы $P_e(t)$ вблизи первых четырех выключений Cs-источника рассмотрим их увеличенные фрагменты на вставке рис. 1. На этой вставке мы использовали “искусственную” шкалу времени (t^*), на которой четыре первых выключения Cs-источника совмещены при $t^* = 0$, а величины $P_e(t^*)$ при $t^* = 0$ приравнены к единице. На встав-

ке рис. 1 видно, что относительные скорости спонтанных уменьшений $P_e(t^*)$ после первых трех прерываний Cs-потока уменьшаются как с увеличением t^* , так и с увеличением номера выключения Cs-источника. Отметим также, что после 1-го и 2-го выключений Cs-источника спонтанные уменьшения $P_e(t^*)$ начинались при $t^* \approx 0$, в то время как после 3-го выключения Cs-источника уменьшение $P_e(t^*)$ началось на ≈ 1.5 мин позднее. На вставке рис. 1 видно также, что 4-е выключение Cs-источника, в отличие от трех предыдущих, сопровождалось заметным увеличением скорости роста $P_e(t^*)$, а спонтанное увеличение $P_e(t^*)$ продолжалось до $t^* \approx 5$ мин. Рисунок 1 показывает, что 5-е включение Cs-источника на ≈ 4 мин снизило $P_e(t)$ до ≈ 0.97 от максимума, но через 25 мин после прерывания Cs-потока $P_e(t)$ вновь спонтанно увеличилась до прежнего значения, обозначенного как P_e^m . Похожие результаты были получены, когда мы включали и выключали Cs-источник еще три раза: $P_e(t)$ вынужденно снижалась после включений Cs-источника и спонтанно увеличивалась после его выключений. Результаты измерений $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределений показаны на рис. 2, 3.

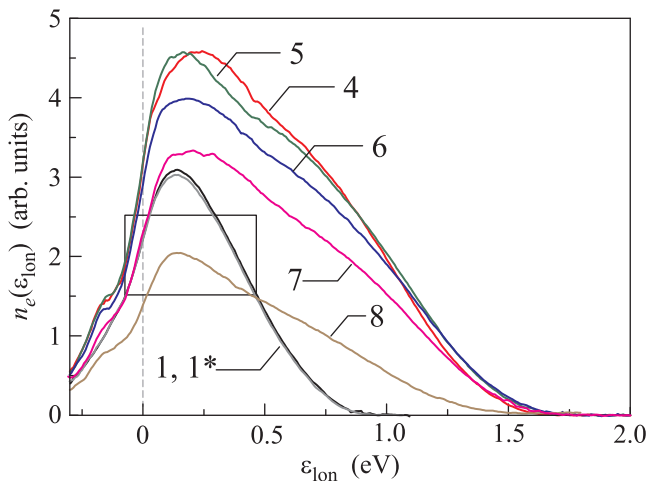


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределения фотоэлектронов по продольным энергиям, измеренные при различных Cs-покрытиях. Номер распределения соответствует номеру выключения Cs-источника

Номера $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределений на рис. 2, 3 совпадают с номерами выключений Cs-источника на рис. 1. Величины χ^* , измеренные после восьми выключений Cs-источника, приведены в табл. 1. Первые два $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределения, обозначенные в табл. 1 как 1, 1*, были измерены друг за другом после 1-го выключения Cs-источника. Фрагменты этих двух распределений, выделенные прямоугольником на рис. 2, показаны на рис. 3. Отметим, что уменьшение χ^* во вре-

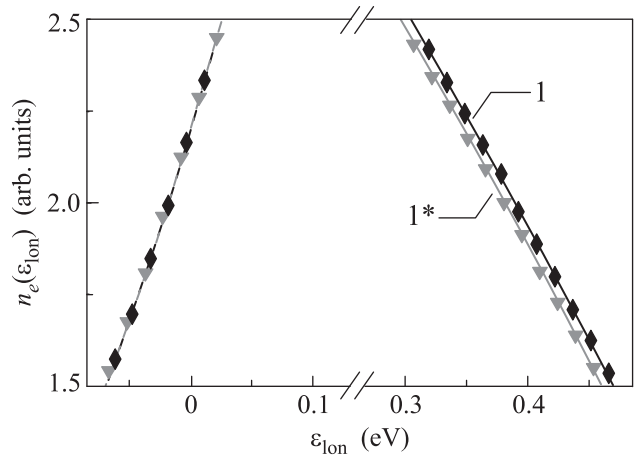


Рис. 3. Фрагменты двух распределений фотоэлектронов по продольным энергиям, измеренных с интервалом 20 мин друг за другом после первого выключения Cs-источника

мя 1-го выключения Cs-источника на 10 мэВ заметно превышает погрешность данного измерения. Из рисунка 2 и табл. 1 следует, что величины χ^* интерфейса и амплитуды $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределений, измеренные после 4-го и 5-го выключений Cs-источника примерно одинаковы, но вершина распределения после 5-го прерывания Cs-потока стала более “узкой”. Параметр уширения вершин $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределений, измеренных после 4-го и 5-го выключений Cs-источника, мы оценили путем расчета величин их вторых производных в максимуме. Параметр уширения вершины $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределения после 5-го выключения Cs-источника оказался в два раза меньше, чем после предыдущего. Из табл. 1 следует также, что величины χ^* для $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределений, измеренных после 4-го–7-го выключений Cs-источника не отличаются значимо друг от друга. Существенное уменьшение χ^* на ≈ 0.2 эВ мы наблюдали только для $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$ -распределения, измеренного после 8-го выключения Cs-источника.

Таблица 1. Величины χ^* для энергетических распределений, измеренных после выключений Cs-источника

Номер $n_e(\varepsilon_{\text{lon}})$	χ^* (эВ)
1	0.858
1*	0.848
4	1.57
5	1.62
6	1.64
7	1.62
8	1.45

При объяснении полученных результатов мы учли, что атомы цезия на атомарно-чистых поверхностях полупроводников при небольших θ_{Cs} в сверхвысоком вакууме самопроизвольно объединяются в упорядоченные одномерные и двумерные кластеры [23]. Кинетика формирования таких кластеров, а также энергетические диаграммы и электронные свойства соответствующих интерфейсов не изучены до сих пор. Результаты наших экспериментов мы объяснили следующим образом. Увеличение $P_e(t)$ на рис. 1 до максимума при увеличении θ_{Cs} обусловлено переносом 6s-электронов с атомов цезия на р-GaN-слой и формированием на интерфейсе р-GaN(Cs)-вакуум ОЭС-состояния [2, 4]. Спонтанные уменьшения $P_e(t)$ и $P_e(t^*)$ на рис. 1 во время выключений Cs-источника при $\theta_{Cs} < \theta_{Cs}^m$ обусловлены, как мы полагаем, энергетически выгодной самосборкой подвижных Cs-атомов в частично упорядоченные двумерные кластеры. Формирование Cs-кластеров на поверхности GaN(0001) теоретически обсуждалось в [24], но экспериментальные исследования этого явления на этом полупроводнике ранее не проводились. Спонтанные уменьшения $P_e(t)$ на рис. 1 при объединении адсорбированных Cs-атомов в кластеры происходят, по-видимому, из-за частичного возврата 6s-электронов на атомы цезия, уменьшающего величину χ^* интерфейса. Уменьшение величины χ^* на ≈ 10 мэВ, обнаруженное нами после 1-го выключения Cs-источника и отмеченное в табл. 1, подтверждает справедливость этого предположения. Самопроизвольное объединение подвижных Cs-атомов в частично упорядоченные Cs-кластеры снижает не только удельную свободную энергию интерфейса р-GaN(Cs)-вакуум (g), но и его удельную энтропию (s). Следовательно, снижение g ОЭС-интерфейса при объединении подвижных Cs-атомов в кластеры фактически обусловлено снижением его удельной энтальпии (h). Самосборка Cs-атомов в 2D-кластеры на интерфейсе р-GaN(Cs)-вакуум началась с момента 1-го включения Cs-источника, но ее влияние на форму $P_e(t)$ во время нанесения цезия при $\theta_{Cs} < \theta_{Cs}^m$ “маскировалось” быстрым увеличением $P_e(t)$ из-за увеличения общего числа адсорбированных Cs-атомов. Плотность Cs-атомов в достаточно больших кластерах, как мы полагаем, ограничена некоторым предельным значением, близким к θ_{Cs}^m . К концу 3-го включения Cs-источника суммарная площадь Cs-кластеров с $\theta_{Cs} \approx \theta_{Cs}^m$ увеличилась, по-видимому, настолько, что заметная доля Cs-атомов в момент 3-го прерывания Cs-потока оставалась на их поверхностях и вызывала дополнительное рассеяние

и рекомбинацию фотоэлектронов на интерфейсе. Поэтому спонтанные изменения $P_e(t^*)$ после 3-го выключения Cs-источника были результатом конкуренции двух процессов: уменьшения $P_e(t^*)$ из-за увеличения суммарной площади Cs-кластеров, а также увеличения $P_e(t^*)$ из-за десорбции “избыточных” Cs-атомов с их поверхностей. Влияние десорбции “избыточных” Cs-атомов завершилось в течение ≈ 1.5 мин и после этого увеличение площади Cs-кластеров вновь вызывало спонтанное уменьшение $P_e(t^*)$. Во время 4-го включения Cs-источника суммарная площадь Cs-кластеров сравнялась, по-видимому, с площадью интерфейса, и при этом заметная доля избыточных Cs-атомов в момент прерывания Cs-потока находилась на его поверхности. Спонтанное увеличение $P_e(t^*)$ в течение ≈ 5 мин после 4-го выключения Cs-источника вызвано, как мы полагаем, десорбцией избыточного цезия с поверхности сплошного Cs-слоя. Стабильность $P_e(t)$ в течение последующих 50 мин указывает на то, что десорбция избыточного цезия с поверхности сплошного Cs-слоя снизила g интерфейса до величины, обеспечивающей стабильность его атомной структуры и фотоэмиссионных свойств при комнатной температуре. Представляется очевидным, что завершение самосборки Cs-атомов в кластеры при $\theta_{Cs} < \theta_{Cs}^m$ также обеспечит стабильность атомной структуры и фотоэмиссионных свойств ОЭС-интерфейса. Таким образом, интерфейс р-GaN(Cs)-вакуум при $\theta_{Cs} \leq \theta_{Cs}^m$ является замкнутой термодинамической системой при комнатной температуре.

Вынужденные уменьшения $P_e(t)$ на рис. 1 после 5-го–7-го включений Cs-источника могут быть вызваны как изменением энергетической диаграммы ОЭС-интерфейса (т.е. уменьшением χ^*), так и увеличением вероятности рассеяния и рекомбинации фотоэлектронов на интерфейсе при их выходе из объема р-GaN-слоя в вакуум. Незначительные различия χ^* после 4-го–7-го выключений Cs-источника в табл. 1 указывают на то, что энергетическая структура ОЭС-интерфейса в этом интервале θ_{Cs} не изменилась существенно. Таким образом, вынужденные уменьшения $P_e(t)$ после 5-го–7-го включений Cs-источника были вызваны не изменением энергетической диаграммы ОЭС-интерфейса, а увеличением вероятностей рассеяния и рекомбинации фотоэлектронов на ОЭС-интерфейсе. Примерное постоянство χ^* интерфейса при небольших превышениях θ_{Cs}^m мы предположительно объяснили двухслойной структурой Cs-покрытия. Величина θ_{Cs} во “внутреннем” слое этого покрытия остается равной θ_{Cs}^m и сохраняется его атомная структура, при которой удельная эн-

тальпия интерфейса достигла минимума. Сохранение атомной структуры “внутреннего” слоя сохраняет энергетическую диаграмму интерфейса и величину χ^* . “Внешний” слой Cs-покрытия, образованный слабосвязанными и подвижными Cs-атомами на поверхности внутреннего слоя при небольших превышениях θ_{Cs}^m не влияет на энергетическую диаграмму интерфейса, но существенно повышает его энтальпию и энтропию. Повышение энтальпии интерфейса при $\theta_{Cs} > \theta_{Cs}^m$ повышает вероятность десорбции Cs-атомов, а увеличение его энтропии увеличивает вероятность упругого и, как следствие, вероятность неупругого рассеяния фотоэлектронов на ОЭС-интерфейсе [12]. Значимое уменьшение χ^* после 8-го включения Cs-источника мы объяснили началом трансформации атомной структуры и электронных свойств Cs-покрытия в направлении свойств объемного цезия.

Таким образом, спонтанные изменения фотоэмиссионных свойств интерфейса р-GaN(Cs)-вакуум, измеренные в актуальном интервале Cs-покрытий, можно самосогласованно объяснить в рамках простой термодинамической модели. Оптимальное Cs-покрытие на интерфейсе р-GaN(Cs)-вакуум с эффективным отрицательным электронным средством, обеспечивающее максимальную вероятность выхода фотоэлектронов в вакуум и ее стабильность, является, по-видимому, специфической двумерной фазой, формирование которой снизило удельные величины свободной энергии и энтропии ОЭС-интерфейса до минимальных значений. Разрушение атомной структуры этой фазы при некотором превышении оптимального Cs-покрытия вызвано, возможно, структурным фазовым переходом.

Авторы благодарят А.А. Саранина за полезные обсуждения и Российский фонд фундаментальных исследований за частичную поддержку данной работы в рамках проекта 16-02-00534.

1. J. J. Sheer and J. van Laar, *Solid State Commun.* **3**, 189 (1965).
2. M. Eyckeler, W. Mönch, T. U. Kampen, R. Dimitrov, O. Ambacher, and M. Stutzmann, *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**, 2224 (1998).
3. A. A. Turnbull and G. V. Evans, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **1**, 155 (1968).
4. C. I. Wu and A. Kahn, *J. Appl. Phys.* **86**, 3209 (1999).
5. В. Г. де-Бур, Г. М. Бескин, С. В. Карпов, В. Л. Плехотниченко, А. С. Терехов, С. Н. Косолюбов, Г. Э. Шайблер, *Астрофизический бюллетень* **64**, 404 (2009).
6. Yu. A. Mamaev, L. G. Gerchikov, Yu. P. Yashin, D. A. Vasiliev, V. V. Kuzmichev, V. M. Ustinov, A. E. Zhukov, V. S. Mikhrin, and A. P. Vasiliev, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 081114 (2008).
7. D. A. Orlov, U. Weigel, D. Schwalm, A. S. Terekhov, and A. Wolf, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **532**, 418 (2004).
8. S. Karkare, L. Boulet, L. Cultrera, B. Dunham, X. Liu, W. Schaff, and I. Bazarov, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 097601 (2014).
9. J. Iveland, L. Martinelli, J. Peretti, J. S. Speck, and C. Weisbuch, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 177406 (2013).
10. А. Г. Журавлев, М. Л. Савченко, А. Г. Паулиш, В. Л. Альперович, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 513 (2013).
11. В. В. Бакин, К. В. Торопецкий, Г. Э. Шайблер, А. С. Терехов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 414 (2015).
12. С. А. Рожков, В. В. Бакин, Д. В. Горшков, С. Н. Косолюбов, Г. Э. Шайблер, А. С. Терехов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 128 (2016).
13. N. Chanlek, J. D. Herbert, R. M. Jones, L. B. Jones, K. J. Middleman, and B. L. Militsyn, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, 055110 (2014).
14. L. J. Whitman, J. A. Stroschio, R. A. Dragoset, and R. J. Celotta, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1338 (1991).
15. H. P. Bonzel, E. I. Altman, M. Bienfait, H. P. Bonzel, H. Brune, R. Diehl, M. Y. L. Jung, V. G. Lifshitz, M. E. Michel, R. Miranda, R. McGrath, K. Oura, A. A. Saranin, E. G. Seebauer, P. Zeppenfeld, and A. V. Zotov, *Adsorption on Surfaces and Surface Diffusion of Adsorbates*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2001).
16. D. L. Smith and D. A. Huchital, *J. Appl. Phys.* **43**, 2624 (1972).
17. О. Е. Терещенко, Г. Э. Шайблер, А. С. Ярошевич, С. В. Шевелев, А. С. Терехов, В. В. Лундин, Е. Е. Заваарин, А. И. Бесюлькин, *ФТТ* **46**, 1881 (2004).
18. Ю. Г. Галицын, В. И. Пошевнев, В. Г. Мансуров, А. С. Терехов, *Приборы и техника эксперимента* **4**, 191 (1988).
19. L. W. James and J. L. Moll, *Phys. Rev.* **183**, 740 (1968).
20. V. V. Bakin, K. V. Toropetsky, H. E. Scheibler, A. S. Terekhov, L. B. Jones, B. L. Militsyn, and T. C. Q. Noakes, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 183501 (2015).
21. А. С. Терехов, Д. А. Орлов, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 827 (1994).
22. Р. Л. Белл, *Эмиттеры с отрицательным электронным средством*, Энергия, М. (1978).
23. F. Bechstedt and M. Scheffler, *Surf. Sci. Rep.* **18**, 145 (1993).
24. Y. Diao, L. Liu, S. Xia, and Y. Kong, *Mater. Res. Express* **4**, 035907 (2017).