

## Состояния изображения на поверхностях бериллия с низкими индексами

© В.М. Силкин<sup>\*,\*\*</sup>, Е.В. Чулков<sup>\*</sup>, П.М. Эченике<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Departamento de Física de Materiales, Facultad de Química, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Apdo. 1072, 200080 San Sebastian/Donostia, Spain

<sup>\*\*</sup> Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, 634021 Томск, Россия

E-mail: waxslavs@sqox01.sq.ehu.es

(Поступила в Редакцию 6 июля 1998 г.)

В рамках метода самосогласованного псевдопотенциала рассчитаны энергии связи состояний изображения для поверхностей (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (11 $\bar{2}$ 0) бериллия. Показано, что для грани (0001) в точке  $\bar{\Gamma}$  поверхностной зоны Бриллюэна существует хорошо выраженное резонансное состояние изображения  $n = 1$  с энергией  $-0.95$  eV. На поверхности (10 $\bar{1}$ 0), имеющей широкую запрещенную энергетическую щель в окрестности вакуумного уровня, рассчитанное состояние изображения  $n = 1$  в точке  $\bar{\Gamma}$  имеет энергию  $-1.2$  eV и является поверхностным состоянием щелевого типа. Для грани (11 $\bar{2}$ 0) в окрестности точки  $\bar{\Gamma}$  отсутствуют запрещенные щели. Однако симметрия объемных состояний вблизи вакуумного уровня делает возможным существование резонансного состояния изображения  $n = 1$  с энергией  $-0.6$  eV.

Известно, что вблизи поверхности металлов наряду с истинными поверхностными электронными состояниями, зарядовая плотность которых локализуется в основном в окрестности поверхностного атомного слоя, существуют состояния, связанные с потенциалом изображения [1–4]. Большая часть зарядовой плотности таких состояний (состояний изображения) расположена вне кристалла, и ее максимум локализуется достаточно далеко от поверхности (от нескольких ангстрем до нескольких сот ангстрем [5]). Энергии этих состояний расположены ниже вакуумного уровня  $E_v$  в пределах 1 eV, образуя энергетический ряд, сходящихся к  $E_v$ , подобный тому, что существует для атома водорода [1–4]. Экспериментально энергии связи состояний изображения определялись с помощью техники обратной фотоэмиссии [6–8], двухфотонной фотоэмиссии [9,10], фотоэмиссии с временным разрешением [11], сканирующей туннельной спектроскопии [12]. Экспериментальные и теоретические работы по изучению состояний изображения проводились в основном для поверхностей, у которых в окрестности вакуумного уровня существует запрещенная энергетическая щель. В этом случае кристалл обладает достаточной отражательной способностью, что является решающим фактором для образования состояний изображения. Эта идея лежит в основе теоретических моделей, оперирующих на языке многократного рассеяния [3,13–15].

С другой стороны, результаты ряда экспериментальных работ для поверхности Al(111), где запрещенная щель расположена далеко от вакуумного уровня, свидетельствуют о существовании особенности в спектре обратной фотоэмиссии в районе 0.5 eV ниже вакуумного уровня [12,16,17]. Считается, что данная особенность связана с существованием резонансного состояния изображения с  $n = 1$ . Это стимулировало появление большого количества теоретических работ, посвященных

изучению состояний изображения на поверхностях (111) и (001) алюминия для выяснения природы образования этих состояний на поверхности, не имеющей запрещенной щели вблизи вакуумного уровня. С использованием различных моделей было показано, что энергия состояния изображения с  $n = 1$  для этих поверхностей лежит в районе от  $-0.4$  [18] до  $-1.0$  eV [19,20] относительно вакуумного уровня. Причем в более поздних работах величина энергии связи расположена между  $-0.8$  и  $-1.0$  eV [20,21], что почти в 2 раза превосходит величину, наблюдаемую в эксперименте. Таким образом, до сих пор для поверхности алюминия существует большое расхождение между результатами различных работ. И хотя большинство работ подтверждает существование резонансного состояния изображения на поверхности алюминия, существование которого связывают с отражением от кристаллической решетки [12,21], вопрос о величине энергии связи этого состояния остается открытым.

В настоящей работе авторы обращаются к изучению состояний изображения на поверхности бериллия с низкими индексами, а именно, для граней (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (11 $\bar{2}$ 0). Для этих трех поверхностей реализуются различные ситуации с точки зрения существования и расположения объемной энергетической щели относительно  $E_v$  [22–25]. Поэтому существует возможность исследовать влияние реальной кристаллической структуры на возникновение и положение состояний изображения для одного и того же материала. Для грани (0001) широкая энергетическая щель в центре поверхностной зоны Бриллюэна расположена в окрестности уровня Ферми [23]. И хотя для бериллия запрещенная щель существенно шире и расположена ближе к  $E_v$ , чем для алюминия, принципиально ситуация для этой грани похожа на ту, что существует для поверхности алюминия. Для грани (10 $\bar{1}$ 0) в окрестности  $E_v$  существует широкая запрещенная щель [24], и поэтому возникающие состояния

изображения должны существовать как щелевые состояния. Для грани  $(11\bar{2}0)$  энергетическая щель в точке  $\bar{\Gamma}$  отсутствует [25]. Для описания этих трех различных ситуаций наиболее предпочтительным является проведение самосогласованных расчетов из первых принципов, когда в рассмотрение включается реальная трехмерная атомная структура кристалла. Такие вычисления были проведены для поверхностей бериллия  $(0001)$ ,  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}0)$  для изучения занятых поверхностных состояний [23–25]. В настоящей работе приводятся результаты расчета методом самосогласованного псевдопотенциала состояний изображения для этих трех поверхностей.

## 1. Метод расчета

Вычисления проводились в модели тонких пленок, периодически повторяющихся в направлении, перпендикулярном плоскости рассматриваемой поверхности, и разделенных вакуумными промежутками. Для каждой поверхности ось координат  $z$  выбрана перпендикулярной поверхности и направленной в сторону вакуумной части. Для граней  $(0001)$  и  $(11\bar{2}1)$  расчеты проводились без учета какой-либо релаксации или реконструкции. Для поверхности  $(0001)$ , где на самом деле существует релаксация поверхностного слоя в несколько процентов [26,27], эта релаксация не влияет на получаемые результаты для состояний изображения, которые в основном локализуются достаточно далеко в вакууме. Эксперимент, проведенный для поверхности  $\text{Be}$   $(11\bar{2}0)$  методом дифракции медленных электронов, показал, что эта поверхность испытывает реконструкцию из структуры  $(1 \times 1)$  в структуру  $(1 \times 3)$  [28]. Поэтому получаемые результаты для идеальной поверхности можно рассматривать как предварительные. Для грани  $(10\bar{1}0)$  существуют две возможности образования поверхности. Ранее было показано, что более предпочтительным является раскол кристалла между атомными плоскостями с большим межслоевым расстоянием, т. е. когда в результате раскола расстояние между поверхностным и вторым атомным слоями является в 2 раза меньше, чем расстояние между вторым и третьим слоями [29,30]. Поэтому расчеты проводились только для этой кристаллической структуры с учетом релаксации двух верхних атомных слоев. В наших расчетах полученная релаксация составляет уменьшение на 19% для первого межслоевого расстояния и увеличение на 8% для второго, что согласуется с другими экспериментальными и теоретическими данными [29,31]. Нелокальный псевдопотенциал бериллия, сохраняющий норму, генерировался согласно [32,33]. В процессе самосогласования обменно-корреляционный потенциал вычислялся в приближении локальной плотности [34]. В качестве базисных функций для разложения волновых функций использовались плоские волны до энергии обрезания, равной  $15 R_y$ . Поскольку приближение локальной плотности (ПЛП) не описывает правильно асимптотическое поведение потенциала в вакуумной части, для получения окончательных результатов мы модифициро-

вали кристаллический потенциал таким образом, что со стороны кристалла при  $z < z_{\text{im}}$  ( $z_{\text{im}}$  — положение плоскости изображения) он совпадает с полученным самосогласованным ПЛП потенциалом, и для  $z$  больших  $z_{\text{im}}$ , в сторону вакуума он имеет следующий вид:

$$V(z) = -\frac{1 - \exp(-\lambda(z - z_{\text{im}}))}{4(z - z_{\text{im}})}. \quad (1)$$

Неизвестный параметр  $\lambda$  в (1) определяется из условия сшивания в плоскости  $z = z_{\text{im}}$  потенциала (1) с самосогласованным ПЛП потенциалом. Положение плоскости изображения  $z_{\text{im}}$  получалось из расчета центра тяжести наведенной электронной плотности в слабом внешнем электрическом поле. Для того чтобы ввести внешнее электрическое поле, небольшая часть электронной плотности перемещается из пленки в центр вакуумного промежутка в виде тонкой пленки отрицательного заряда с поверхностной зарядовой плотностью  $\sigma$ . Таким образом, в целом элементарная ячейка в процессе расчетов остается электронейтральной. Подобная модель использовалась, например, в [35]. Вместе с пленкой эта электронная плотность создает в вакуумной части электрическое поле с напряженностью

$$\varepsilon = 4\pi\sigma. \quad (2)$$

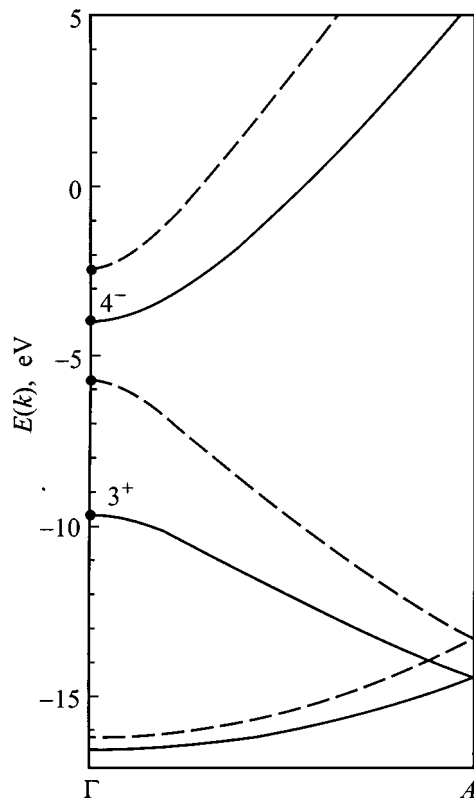
Для получения наведенной зарядовой плотности проводились расчеты для напряженностей  $\varepsilon = 0.0025, 0.0050, 0.0075$  и  $0.0100$  а. е. ( $1$  а. е. =  $5.14 \times 10^7$  eV·cm<sup>-1</sup>). В этом случае положение плоскости изображения определялось как

$$z_{\text{im}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} z_{\text{im}}(\varepsilon). \quad (3)$$

Полученные значения  $z_{\text{im}}$  для  $(0001)$ ,  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}0)$  граней составляют соответственно 2.75, 2.63 и 2.74 а. е. относительно поверхностного слоя атомов.

## 2. Результаты расчетов и обсуждение

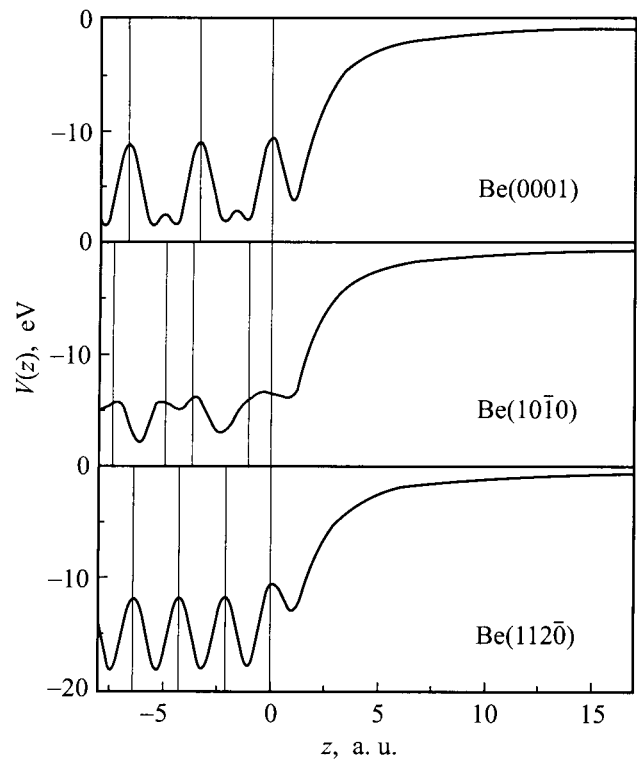
2.1. Поверхность  $(0001)$ . Проекционная зонная структура в точке  $\bar{\Gamma}$  поверхностной зоны Бриллюэна для грани  $(0001)$  получается путем проектирования энергетического спектра вдоль направления  $\Gamma$ – $A$  объемной зоны Бриллюэна. Объемный спектр для бериллия вдоль этого направления показан на рис. 1. Запрещенная щель в точке  $\bar{\Gamma}$ , образуемая состояниями  $\Gamma_{3+}$  и  $\Gamma_{4-}$ , будет располагаться в интервале от  $-9.8$  до  $-4.1$  eV. Самосогласование для этой грани проводилось с использованием 10-слойной пленки. Затем в середину пленки дополнительно было вставлено 10 атомных объемных слоев, и окончательные результаты были получены для 20-слойной пленки. Из-за конечной толщины используемой в расчете пленки в результате получаем ряд дискретных энергетических уровней. Для того чтобы получить поверхностную плотность состояний (ППС), рассчитанный энергетический спектр размывается с учетом распределения Гаусса и доли зарядовой плотности



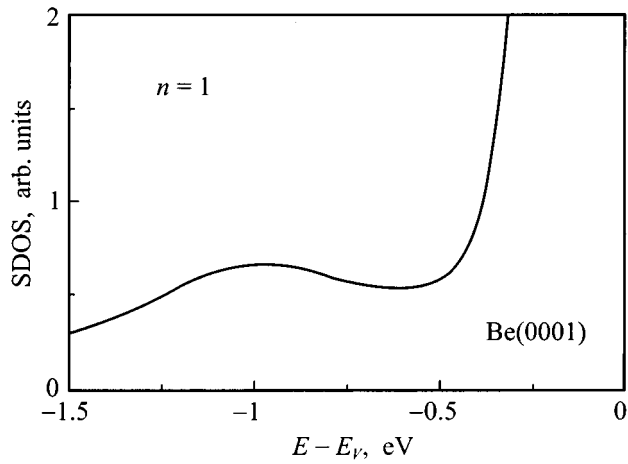
**Рис. 1.** Энергетический спектр вдоль направления  $\Gamma$ — $A$  объемной зоны Бриллюэна, соответствующий проекции в точку  $\Gamma$  для поверхности (0001). Спектр, рассчитанный самосогласованным методом псевдопотенциала, изображен сплошными линиями. Объемный спектр, полученный с использованием одномерного потенциала, показан штриховыми линиями. Состояния, определяющие края запрещенной щели, отмечены точками. Величины энергий приведены относительно вакуумного уровня для поверхности (0001). Рассчитанная величина работы выхода для этой грани составляет 5.35 eV.

каждого состояния вне геометрического края кристалла. В полученной ППС существует максимум для состояния с  $n = 1$  с энергией  $-0.95$  eV. В работе [21] был предложен метод расчета ППС, когда для построения потенциала внутри кристалла использовалась усредненная в плоскости, параллельной поверхности, локальная часть потенциала, полученного в самосогласованном псевдопотенциальном расчете. В этом случае результирующий потенциал зависит только от координаты  $z$ , и возможно проведение расчетов с учетом нескольких сотен атомных слоев. Для проверки адекватности этого подхода был проведен расчет с использованием усредненной локальной части потенциала, изображенной на рис. 2, для той же самой 20-слойной пленки бериллия, которая использовалась в трехмерном расчете. Одноэлектронные энергии полученных состояний в окрестности локализации состояния изображения с  $n = 1$  совпадают с найденными в рамках полного трехмерного расчета в пределах 0.1 eV. Положение максимума соответствующей

этой этому потенциалу ППС совпадает с полученным для трехмерного потенциала с точностью 0.05 eV. Таким образом, для этой грани, по-видимому, отражательная способность обоих потенциалов является достаточно близкой, хотя электронная структура для усредненного потенциала внутри кристалла количественно отличается от той, что существует для трехмерного потенциала. Как видно на рис. 1 спектр для одномерного потенциала имеет более узкую щель и она расположена заметно выше по энергии. Ранее в работе [36] было показано, что, например для поверхности Li(110), где состояние изображения с  $n = 1$  расположено в щели, замена полного трехмерного потенциала на усредненный приводит к изменению до 0.2 eV величины энергии связи этого состояния. Это было объяснено различными величинами и положением энергетической щели для двух потенциалов. По-видимому, для состояний изображения, реализующихся в виде резонансов и расположенных достаточно далеко от энергетической щели, изменение ее параметров не так заметно сказывается на их энергетическом положении. С другой стороны, возможно, что для поверхности Be(0001) происходит некоторая компенсация за счет того, что для одномерного потенциала щель уже, чем для трехмерного. Поэтому она слабее



**Рис. 2.** Усредненные в плоскости, параллельной поверхности, локальные части самосогласованного псевдопотенциала для трех поверхностей бериллия. Начало отсчета координаты  $z$  выбрано относительно положения поверхностного атомного слоя. Положения атомных слоев для каждой поверхности показаны вертикальными тонкими линиями. В нижней части каждого рисунка указан соответствующий типа грани.



**Рис. 3.** Поверхностная плотность состояний в точке  $\bar{\Gamma}$  для поверхности Be(0001). Пик в области энергий  $-0.95$  eV соответствует состоянию изображения  $n = 1$ .

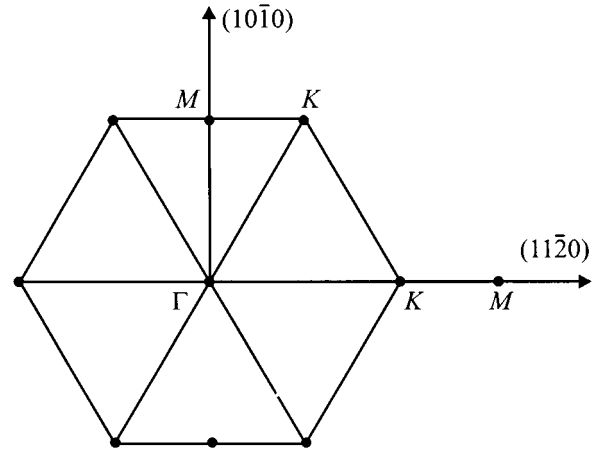
влияет на состояния изображения. В то же время она расположена ближе к вакуумному уровню, что усиливает отрагательную способность. Проведенные нами подобные вычисления для поверхности Al(001) приводят к аналогичному результату.

Для изучения зависимости результатов от толщины пленки, авторы провели расчет, используя одномерный потенциал, для пленки, состоящей из 401 атомного слоя. Вычисленная поверхностная плотность состояний изображена на рис. 3. Из рисунка видно, что положение пика для  $n = 1$  совпадает с полученным для более тонкой пленки. И если для поверхности алюминия состояние с  $n = 1$  проявляется скорее в виде плеча, то для Be(0001) оно является хорошо выраженным и должно быть заметно при проведении фотоэмиссионных исследований.

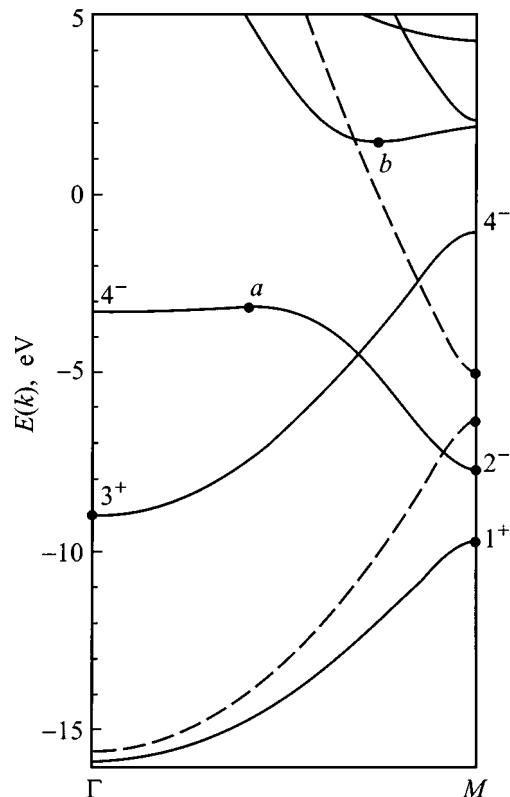
**2.2. Поверхность  $(10\bar{1}0)$ .** Проекция объемной зонной структуры для этой грани в точке  $\bar{\Gamma}$  получается путем проектирования вдоль направления  $\Gamma$ – $M$  объемной зоны Бриллюэна, для которой на рис. 4 изображена плоскость  $\Gamma$ – $K$ – $M$ . Энергетический спектр вдоль направления  $\Gamma$ – $M$  изображен на рис. 5. Видно, что для этой грани в рассматриваемом энергетическом интервале существуют две запрещенные щели. Нижняя, образуемая состояниями  $M_{1+}$  и  $M_{2-}$ , расположена в интервале от  $-9.7$  до  $-7.7$  eV. При этом для энергий от  $-9.7$  до  $-9.05$  eV она является абсолютной, а от  $-9.05$  до  $-7.7$  eV относительной (за счет состояний вблизи точки  $\Gamma_{3+}$ ). В целом эта щель является запрещенной для объемных состояний, обладающих симметрией  $s$ ,  $p_z$ -типа. Верхняя щель также имеет две части. Нижняя часть, так называемая симметричная щель, лежит между  $-3.15$  (точка **a**) и  $-1.0$  eV (точка  $M_{4-}$ ), и абсолютная щель расположена между  $-1.0$  и  $1.45$  eV (точка **b**). Как и нижняя щель, в целом эта щель является запрещенной для объемных состояний  $s$ ,  $p_z$ -типа.

Для этой грани самосогласованный расчет проводился с использованием 12-слойной пленки. Затем, аналогично

тому, как это было сделано для грани (0001), внутри пленки добавлялось 12 атомных слоев, и окончательные результаты были получены для 24-слойной пленки. Расчет показывает, что вблизи середины верхней запрещенной щели находится состояние изображения с



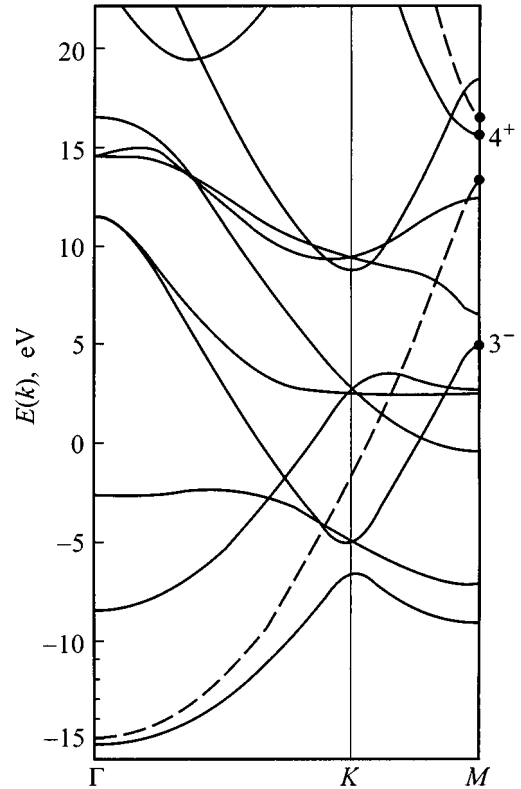
**Рис. 4.** Плоскость  $\Gamma$ – $K$ – $M$  объемной зоны Бриллюэна.



**Рис. 5.** Энергетический спектр вдоль направления  $\Gamma$ – $M$  объемной зоны Бриллюэна, соответствующий проекции в точку  $\bar{\Gamma}$  для поверхности  $(10\bar{1}0)$ . Обозначения соответствуют рис. 1. Величины энергий приведены относительно вакуумного уровня для поверхности  $(10\bar{1}0)$ . Рассчитанная величина работы выхода для этой грани составляет  $4.7$  eV.

$n = 1$ . Его энергия составляет  $E_1 = 1.2 \text{ eV}$ . Хотя это состояние расположено в области существования объемных состояний, оно проявляет себя как нерезонансное состояние изображения, поскольку его волновая функция в окрестности расположения поверхностных атомных слоев обладает симметрией  $s$ ,  $p_z$ -типа и поэтому ортогональна объемным состояниям, расположенным в этом интервале энергий. Второе состояние изображения с энергией  $E_2 = -0.31 \text{ eV}$  расположено внутри абсолютной энергетической щели. На рис. 2 изображена усредненная в плоскости ( $xy$ ) локальная часть потенциала для этой грани. Зонный спектр, соответствующий объемной части этого потенциала, изображен штриховыми линиями на рис. 5. Видно, что он качественно отличается от спектра для трехмерного потенциала. Для одномерного потенциала существует только одна запрещенная щель, которую можно соотнести с нижней запрещенной щелью для реального потенциала, поскольку эта щель для обоих потенциалов может быть описана матричными элементами, соответствующими одному и тому же вектору обратной решетки. Верхняя щель для трехмерного потенциала не связана ни с каким матричным элементом и не может быть получена в рамках одномерной модели. Ее существование полностью связано с трехмерной структурой кристалла. В результате, для усредненного потенциала полученный энергетический спектр в области вакуумного уровня существенно отличается от полученного для трехмерного потенциала. В этом случае состояния изображения появляются в области существования объемных состояний и проявляют себя в виде резонансов. В соответствующей ППС отсутствует выраженный максимум, отвечающий состоянию с  $n = 1$ , и существует только плечо в области энергий при  $-0.8 \text{ eV}$ . Таким образом, для этой грани невозможно получить физически правильный результат для состояний изображения, используя усредненный потенциал. Их появление на этой грани в виде истинных состояний изображения связано с существованием запрещенной щели, которая является прямым следствием трехмерной атомной структуры кристалла.

2.3. Поверхность  $(11\bar{2}0)$ . Проекция объемной зонной структуры для грани  $(11\bar{2}0)$  в точке  $\Gamma$  поверхностной зоны Бриллюэна получается проектированием спектра вдоль направлений  $\Gamma-K-M$  объемной зоны Бриллюэна. Как следует из рис. 6, где изображена соответствующая электронная структура, для этой грани в точке  $\Gamma$  отсутствует какая-либо запрещенная щель в рассматриваемом интервале энергий. Анализ орбитального состава показывает, что соответствующая запрещенная щель для трехмерного потенциала могла бы получаться путем проектирования спектра из точек  $M_{3-}$  и  $M_{4+}$ . Однако в интервале энергий  $E_{M_{4+}} - E_{M_{3-}}$  существуют несколько энергетических зон. Эти зоны обладают в основном симметрией  $p_x$ - и  $p_y$ -типа с небольшой примесью состояний  $s$ -типа. Поэтому, несмотря на отсутствие явной запрещенной щели для этой грани, большинство объемных энергетических зон вдоль направ-



**Рис. 6.** Энергетический спектр вдоль направления  $\Gamma-K-M$  объемной зоны Бриллюэна, соответствующий проекции в точку  $\Gamma$  для поверхности  $(11\bar{2}0)$ . Обозначения соответствуют рис. 1. Величины энергий приведены относительно вакуумного уровня для поверхности  $(11\bar{2}0)$ . Рассчитанная величина работы выхода для этой грани составляет  $4.05 \text{ eV}$ .

лений  $\Gamma-K-M$  не оказывает влияния на существование и энергетическое положение состояний изображения.

Самосогласование для этой грани проводилось для 9-слойной пленки. Окончательные результаты были получены для 17-слойной пленки. В результате размытия соответствующего энергетического спектра с учетом доли заряда в вакуумной области в полученной ППС существует заметный пик с энергией  $-0.6 \text{ eV}$ , соответствующий состоянию с  $n = 1$ . Как и для двух других поверхностей авторы также провели расчет с использованием соответствующего одномерного потенциала, изображенного на рис. 2. На рис. 6 штриховыми линиями показан энергетический спектр, соответствующий кристаллической части этого потенциала. Из рисунка видно, что запрещенная щель расположена очень высоко над вакуумным уровнем между  $13.5$  и  $16.6 \text{ eV}$ , т.е. является существенно более узкой и расположена выше, чем щель для трехмерного потенциала. Такое положение энергетической щели для усредненного потенциала приводит к тому, что в соответствующей ППС отсутствует выраженный пик в интервале энергий ниже  $-0.5 \text{ eV}$ . Существует только плечо с энергией  $-0.5 \text{ eV}$ , связанное с состоянием изображения  $n = 1$ .

Таким образом, проведенные самосогласованные псевдопотенциальные расчеты для поверхностей (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (11 $\bar{2}$ 0) бериллия показывают, что для них существуют различные условия существования состояний изображения, связанные с величиной и положением энергетических щелей в точке  $\bar{\Gamma}$  поверхностной зоны Бриллюэна. Для грани (0001), где в области уровня Ферми есть широкая запрещенная щель, должно существовать хорошо выраженное состояние изображения с  $n = 1$  резонансного типа с энергией  $-0.95$  eV. На поверхности (10 $\bar{1}$ 0), имеющей широкую запрещенную щель в окрестности вакуумного уровня, рассчитанное состояние изображения с  $n = 1$  имеет энергию связи  $-1.2$  eV и является состоянием изображения щелевого типа. Энергетический спектр для грани (11 $\bar{2}$ 0) не имеет абсолютной энергетической щели. Но за счет симметрии большинства объемных энергетических зон существуют условия для возникновения состояний изображения. В результате возможно существование резонансного состояния изображения с  $n = 1$  с энергией  $-0.6$  eV. Сравнение полученных результатов для грани (0001), полученных с трехмерным кристаллическим потенциалом и усредненным одномерным потенциалом показывает, что в целом они совпадают. Для поверхности (10 $\bar{1}$ 0) использование одномерного потенциала не позволяет как количественно, так и качественно описать состояния изображения. На поверхности (11 $\bar{2}$ 0) результаты для обоих потенциалов свидетельствуют о существовании резонансного состояния изображения с  $n = 1$ , но имеется различие в его энергетическом положении порядка  $0.1$  eV. Таким образом, использование усредненного одномерного потенциала не всегда является оправданным, хотя для плотноупакованных граней, по-видимому, он может удовлетворительно описывать отражательную способность кристаллической решетки.

Авторы выражают благодарность отделу образования правительства Страны Басков, которое частично финансировало проведение работ по этому проекту.

## Список литературы

- [1] M. Cole, M.H. Cohen. Phys. Rev. Lett. **23**, 1238 (1969).
- [2] В.Б. Шикин. ЖЭТФ **31**, 936 (1970).
- [3] P.M. Echenique, J.B. Pendry. J. Phys. **C11**, 2065 (1978).
- [4] P.M. Echeique, J.B. Pendry. Progr. Surf. Sci. **32**, 11 (1990).
- [5] U. Hofer, I.L. Shumay, Ch. Reuss, U. Thomann, W. Wallauer, Th. Fauster. Science **277**, 1480 (1997).
- [6] F.J. Himpsel. Comments Cond. Matter Phys. **12**, 199 (1986).
- [7] N.V. Smith. Rep. Prog. Phys. **51**, 1227 (1988).
- [8] F.J. Himpsel, J.E. Ortega. Phys. Rev. **B46**, 9719 (1992).
- [9] T. Fauster, W. Steinmann. In: Electromagnetic Waves: Recent Development in Research / Ed. by P. Halevi. Elsevier, Amsterdam (1995). Vol. 2. P. 350.
- [10] K. Giesen, F. Hage, F.J. Himpsel, H.J. Riess, W. Steinmann. Phys. Rev. **B35**, 971 (1987).
- [11] M. Wolf, E. Knoesel, T. Hertel. Phys. Rev. **B54**, R5295 (1996).
- [12] S. Yang, R.A. Bartynski, G.P. Kochanski, S. Papadia, T. Fonden, M. Persson. Phys. Rev. Lett. **70**, 849 (1993).
- [13] E.G. McRae. Rev. Mod. Phys. **51**, 541 (1979).
- [14] M. Ortuno, P.M. Echenique. Phys. Rev. **B34**, 5199 (1986).
- [15] P.M. Echenique, M.E. Uranga. Surf. Sci. **247**, 125 (1991).
- [16] D. Heskett, K.-H. Frank, E.E. Koch, H.-J. Freund. Phys. Rev. **B36**, 1276 (1987).
- [17] D. Heskett, K.-H. Frank, K. Horn, E.E. Koch, H.-J. Freund, A. Baddorf, K.-D. Tsuei, E.W. Plummer. Phys. Rev. **B37**, 10387 (1988).
- [18] A.G. Eguluz, M. Heinrichsmeier, A. Fleszar, W. Hanke. Phys. Rev. Lett. **68**, 1359 (1992).
- [19] F. Finocchi, C.M. Bertoni, S. Ossicini. Vacuum **41**, 535 (1990).
- [20] T. Fonden, S. Papadia, M. Persson. J. Phys. Condens. Matter **7**, 2697 (1995).
- [21] L. Jurczykyszyn, M. Steslicka. Surf. Sci. Lett. **376**, L424 (1997).
- [22] D.A. Papaconstantopoulos. The band structure of elemental solids. Plenum Press, N. Y. (1986).
- [23] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, E.N. Shirykalov. Surf. Sci. **188**, 287 (1987).
- [24] В.М. Силкин, Е.В. Чулков. ФТТ **37**, 2795 (1995).
- [25] В.М. Силкин, Е.В. Чулков. Поверхность **11**, 46 (1993).
- [26] H. Davis, J.B. Hannon, K. Ray, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **68**, 2632 (1992).
- [27] P. Feibelman. Phys. Rev. **B46**, 2532 (1992).
- [28] J.B. Hannon, E.W. Plummer, R.M. Wentzcovitch, P.K. Lam. Phys. Rev. **46**, 7942 (1992).
- [29] Ph. Hofmann, K. Pohl, R. Stumpf, E.W. Plummer. Phys. Rev. **B53**, 13 715 (1996).
- [30] Ph. Hofmann, R. Stumpf, V.M. Silkin, E.V. Chulkov, E.W. Plummer. Surf. Sci. Lett. **355**, L278 (1996).
- [31] O. Hjorstam, J. Trygg, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. Surf. Sci. **355**, 214 (1996).
- [32] В.М. Силкин, Е.В. Чулков, И.Ю. Складнева, В.Е. Панин. Изв. вузов. Физика **9**, 56 (1984).
- [33] Е.В. Чулков, В.М. Силкин, Е.Н. Ширыкалов. ФММ **64**, 213 (1987).
- [34] L. Hedin, B.I. Lundqvist. J. Phys. **C4**, 2062 (1971).
- [35] S.C. Lam, R.J. Needs. Surf. Sci. **277**, 173 (1992).
- [36] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Surf. Sci. Lett. **391**, L1217 (1997).