

# О РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМАХ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ И ДЫРОЧНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ Ag(110)

С. В. Еремеев<sup>a,b,c,\*</sup>, С. С. Циркин<sup>b</sup>, Е. В. Чулков<sup>c,d</sup>

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

<sup>b</sup> Томский государственный университет  
634050, Томск, Россия

<sup>c</sup> Donostia International Physics Center/Euskal Herriko Unibertsitatea  
20018, San Sebastián/Donostia, Spain

<sup>d</sup> Universidad del País Vasco  
20080, San Sebastián/Donostia, Spain

Поступила в редакцию 28 октября 2009 г.

Представлены результаты детального теоретического исследования электрон-фононного рассеяния электронных и дырочных возбуждений в незанятом и занятом поверхностных состояниях на поверхности Ag(110). Показано, что в незанятом состоянии параметр  $\lambda$  электрон-фононной связи примерно в три раза меньше, чем в занятом поверхностном состоянии, вследствие того, что рассеяние данных состояний определяется различными фононными модами. Различия в обусловленных фононами механизмах затухания электронных и дырочных возбуждений определяются различной пространственной локализацией незанятого и занятого поверхностных состояний в точке  $\bar{\Gamma}$  двумерной зоны Бриллюэна.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Электронные низкоэнергетические возбуждения в металлических системах играют важную роль во многих физических и химических явлениях. Эти возбуждения являются ключевым механизмом в переносе энергии в реакциях на поверхности твердого тела, в частности в процессах окисления и десорбции [1], фотодиссоциации и фотодесорбции [2, 3], в каталитических реакциях [4, 5]. Поверхностные электронные состояния также имеют огромное значение при эпитаксиальном росте, поскольку их депопуляция существенно модифицирует диффузионные барьеры [6, 7]. Детальное понимание динамики электронных и дырочных возбуждений в поверхностных состояниях является одним из ключевых моментов для решения перечисленных выше проблем, и в этом направлении в последнее время был достигнут значительный прогресс [8, 9].

Ширина линии  $\Gamma$  поверхностного состояния (величина, обратная времени жизни возбуждения  $\tau = \hbar/\Gamma$ ) определяется вкладами от трех различных процессов: неупругого электрон-электронного рассеяния ( $\Gamma_{e-e}$ ), электрон-фононного взаимодействия ( $\Gamma_{e-ph}$ ) и рассеяния на дефектах ( $\Gamma_{e-d}$ ). При этом термическое уширение линии связано в основном с электрон-фононным взаимодействием (ЭФВ) [10, 11], а также с температурно-зависимой частью величины  $\Gamma_{e-d}$ , которая зависит от концентрации поверхностных точечных дефектов в соответствии с законом Аррениуса [12, 13]. В пределе нулевой температуры вклад ЭФВ, как правило, составляет лишь несколько миллиэлектронвольт, однако уже при комнатных температурах он становится одним из доминирующих. В последнее десятилетие ЭФВ на поверхностях металлов являлось предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований (см. обзоры [8, 9, 14–16]). Главным образом прогресс в данной области был обеспечен развитием методов, позволяющих непосредственно исследовать времен-

\*E-mail: eremeev@ispms.tsc.ru

ные характеристики динамики возбужденных состояний, и прежде всего метода фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [16]. Большинство из этих экспериментальных исследований в силу имеющихся ограничений и сопутствующие им теоретические расчеты были выполнены для плотноупакованных металлических поверхностей. Лишь несколько, достаточно старых экспериментальных работ касались оценки ЭФВ на поверхностях благородных металлов с ориентацией (110) [18, 17]. Однако именно более открытые поверхности, такие как поверхность (110) ГЦК-металлов или ступенчатые поверхности, зачастую представляют больший физический интерес. В частности, такие поверхности обладают большей каталитической активностью, чем плотноупакованные грани тех же металлов [19].

В настоящей работе мы представляем результаты расчетов ЭФВ для возбужденных электронов и дырок на поверхности Ag(110). Мы показываем, что параметр ЭФВ в незанятом поверхностном состоянии в точке  $\bar{Y}$  в три раза меньше, чем в занятом состоянии, благодаря различным фоновым модам, участвующим в рассеянии квазичастичных возбуждений.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА

Фоновый вклад во время жизни состояний может быть выражен в терминах спектральной функции Элиашберга  $\alpha^2 F(\omega)$  [20]. Данная функция учитывает эмиссию ( $E$ ) и абсорбцию ( $A$ ) фононов в процессе рассеяния электронных возбуждений. Электрон-фононный вклад в уширение спектральной линии поверхностного состояния с волновым вектором  $\mathbf{k}_i$  и энергией  $\epsilon_{\mathbf{k}_i}$  определяется в виде

$$\Gamma_{e-ph}(\mathbf{k}_i) = 2\pi \int_0^{\omega_{max}} \{ \alpha^2 F_{\mathbf{k}_i}^E(\omega) [1 + n(\omega) - f(\epsilon_{\mathbf{k}_i} - \omega)] + \alpha^2 F_{\mathbf{k}_i}^A(\omega) [n(\omega) + f(\epsilon_{\mathbf{k}_i} + \omega)] \} d\omega, \quad (1)$$

где  $\omega_{max}$  — максимальная частота фононов,  $n(\omega)$  и  $f(\epsilon)$  — соответственно функции распределений Бозе и Ферми. В одноэлектронном состоянии ( $\Psi_{\mathbf{k}_i}, \epsilon_{\mathbf{k}_i}$ ) ЭФВ описывается параметром  $\lambda_{\mathbf{k}_i}$ , который определяется как

$$\lambda_{\mathbf{k}_i} = \int_0^{\omega_{max}} \frac{\alpha^2 F_{\mathbf{k}_i}^E(\omega) + \alpha^2 F_{\mathbf{k}_i}^A(\omega)}{\omega} d\omega. \quad (2)$$

Спектральная функция Элиашберга для электронного (дырочного) состояния в приближении квазиупругого рассеяния, когда  $\delta(\epsilon_{\mathbf{k}_i} - \epsilon_{\mathbf{k}_f} \pm \omega_{\mathbf{q},\nu}) \approx \delta(\epsilon_{\mathbf{k}_i} - \epsilon_{\mathbf{k}_f})$  имеет вид

$$\alpha^2 F_{\mathbf{k}_i}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq \sum_{\nu,f} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q},\nu}) \times |g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f, \mathbf{q}, \nu)|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}_i} - \epsilon_{\mathbf{k}_f}), \quad (3)$$

где  $g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f, \mathbf{q}, \nu)$  — матричный элемент ЭФВ, который отражает вероятность рассеяния из начального состояния  $\Psi_{\mathbf{k}_i}$  с энергией  $\epsilon_{\mathbf{k}_i}$  в конечное состояние  $\Psi_{\mathbf{k}_f}$  с энергией  $\epsilon_{\mathbf{k}_f}$  за счет фонона с энергией  $\omega_{\mathbf{q},\nu}$  и волновым вектором  $\mathbf{q}$ . Суммирование в формуле (3) проводится по всем возможным конечным состояниям  $\Psi_{\mathbf{k}_f}$  и всем фоновым модам. Матричный элемент ЭФВ имеет вид

$$g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f, \mathbf{q}, \nu) = \sqrt{\frac{1}{2M\omega_{\mathbf{q},\nu}}} \langle \Psi_{\mathbf{k}_i} | \hat{\epsilon}_{\mathbf{q},\nu} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} V_{sc} | \Psi_{\mathbf{k}_f} \rangle, \quad (4)$$

где  $M$  — масса атома,  $\hat{\epsilon}_{\mathbf{q},\nu}$  — векторы поляризации фононов,  $\nabla_{\mathbf{R}} V_{sc}$  — градиент экранированного электрон-ионного потенциала, вычисляемый относительно позиций  $\mathbf{R}$  атомов.

Для расчета функции Элиашберга в объемных материалах были развиты теоретические методы, подробно описанные в обзоре [21]. В данной работе мы используем подход, подобный применяемому ранее для изучения ЭФВ в поверхностных состояниях и состояниях квантовой ямы на плотноупакованных поверхностях и поверхностях с адслоями [13, 22–26]. Этот подход включает в себя три независимых приближения для расчета матричного элемента ЭФВ (4): 1) одноэлектронный потенциал  $V_{sc}$ , как и в работах [13, 22–26], выбирается в виде псевдопотенциала Ашкрофта, экранированного в приближении Томаса–Ферми; 2) для расчета фононного спектра мы используем межатомные потенциалы, построенные в рамках метода погруженного атома (МПА) [27]; 3) для расчета электронного спектра в настоящей работе используется недавно предложенная модель [28, 29], которая учитывает дисперсию электронного (дырочного) состояния вдоль направления  $\bar{Y}\bar{Y}$  (в направлении  $\bar{Y}\bar{S}$  предполагается параболическая дисперсия).

При расчете фононного спектра поверхности Ag(110) используется 33-слойная пленка, в плоскости поверхности которой налагаются периодические граничные условия. Данное количество слоев является достаточным для исключения взаимодействия противоположных поверхностей пленки. Такая же пленка используется для расчета электронной зонной структуры. Для исключения эффекта конечности толщины пленки (дискретности объемных электронных зон) мы используем достаточно большое

( $1 \cdot 10^{-2}$  На) гауссово размытие в дельта-функции  $\delta(\epsilon)$  при вычислении спектральной функции (3). Расчеты колебательного спектра проводятся путем нахождения собственных значений и собственных векторов динамической матрицы. Локальные плотности  $F_{X,Y,Z}(\omega)$  колебательных состояний определяются проектированием собственных мод на атомы поверхности в выбранном ( $X, Y, Z$ ) направлении.

В отличие от поверхностей (001) и (111), изучавшихся ранее, где поверхностные состояния локализованы в центре двумерной зоны Бриллюэна и электронная структура может быть описана псевдопотенциалом, изменяющимся только в направлении, перпендикулярном поверхности [30], для описания зонной структуры поверхности (110) в точке  $\bar{Y}$  требуется псевдопотенциал, зависящий от двух переменных [28, 29]. Подгонка параметров модели для описания зонной структуры поверхностей с ориентацией (110) для ряда благородных металлов была сделана в работе [29]. Волновые функции в данной двумерной модели имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\Omega_0 N_{\parallel}}} \exp(ik_x x) \times \sum_{g_y} \exp[i(k_y + g_y)y] \phi_{k_y}^{g_y}(z),$$

где  $\Omega_0$  — площадь двумерной элементарной ячейки,  $N_{\parallel}$  — число атомов в слое,  $g_y = 2\pi n/a$ ,  $n$  — целое число,  $a$  — параметр решетки.

Матричный элемент взаимодействия в рамках данной модели может быть записан в виде

$$g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f, \mathbf{q}, \nu) = \sqrt{\frac{1}{2M\omega_{\mathbf{q},\nu}\Omega_0}} \sum_{g_y^i, g_y^f} \int dz \phi_{i, k_y^i}^{g_y^i}(z) \times G_{\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{G}_{\parallel}, g_y^f - g_y^i, z) \phi_{f, k_y^f}^{g_y^f}(z). \quad (5)$$

Здесь

$$G_{\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{G}_{\parallel}, g_y^f - g_y^i, z) = \sum_{R_{\alpha,z}} \hat{\epsilon}_{\mathbf{q},\nu}(R_{\alpha,z}) \times \mathbf{F}_0(q_x + G_x, q_y + G_y + g_y^f - g_y^i, z - R_{\alpha,z}) \times \exp(-iG_x R_{\alpha,x}) \exp[-i(G_y + g_y^f - g_y^i)R_{\alpha,y}], \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_0(\mathbf{k}, z) = -i\mathbf{k} V_{sc}(\mathbf{k}, z) + \mathbf{e}_z \frac{d}{dz} V_{sc}(\mathbf{k}, z), \quad (7)$$

$\mathbf{G}_{\parallel}$  — двумерный вектор обратной решетки, который удовлетворяет соотношению  $\pm(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) = \mathbf{q} + \mathbf{G}_{\parallel}$ , где знаки «+» и «-» соответствуют процессам абсорбции и эмиссии фонона,  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор вдоль оси  $z$ .

Энергия, мэВ

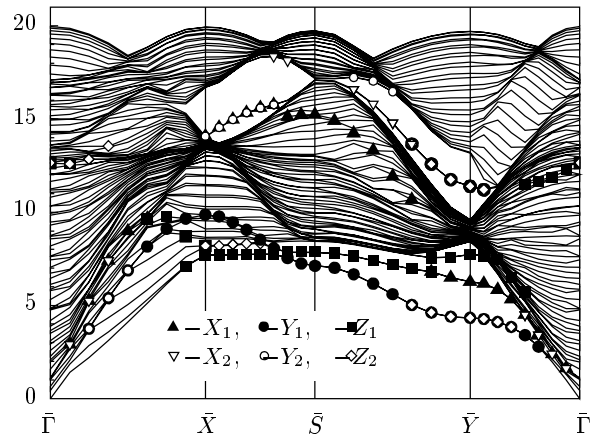


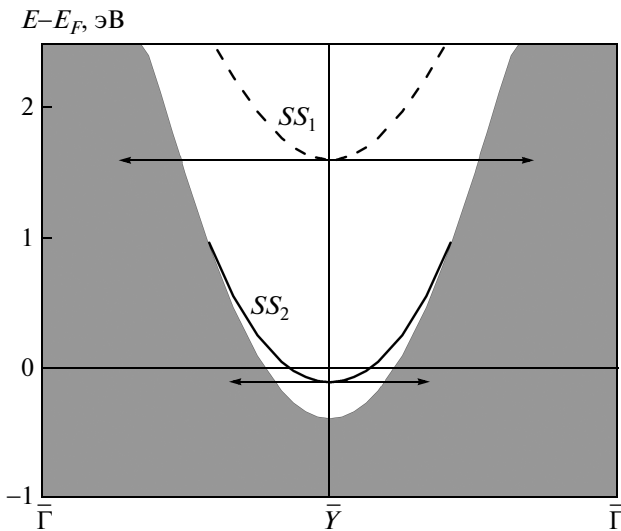
Рис. 1. Фононные дисперсионные кривые для поверхности Ag(110). Символами показаны моды, локализованные на первом и втором атомных слоях и их поляризации

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанный фононный спектр вдоль направлений высокой симметрии в неприводимой части поверхностной зоны Бриллюэна показан на рис. 1, где выделены колебательные моды, локализованные на первом и втором поверхностных атомных слоях и показана их поляризация. Используемые МПА-потенциалы описывают колебательные состояния поверхности серебра в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными [31–33] и расчетными [34, 35] данными.

Особенностью электронной структуры поверхности (110) благородных ГЦК-металлов, в частности Ag(110), является наличие в  $\bar{Y}$ -щели двух поверхностных состояний: незанятого,  $s$ - $p_z$ -типа, лежащего на  $1.6 \pm 0.2$  эВ выше энергии Ферми  $E_F$  [36], и занятого,  $p_y$ -типа, с энергией  $-0.106$  эВ [37]. Это обстоятельство дает возможность рассмотреть затухание электронных и дырочных поверхностных возбуждений в одной системе. Электронная структура поверхности Ag(110), рассчитанная с использованием нашего модельного псевдопотенциала, представлена на рис. 2.

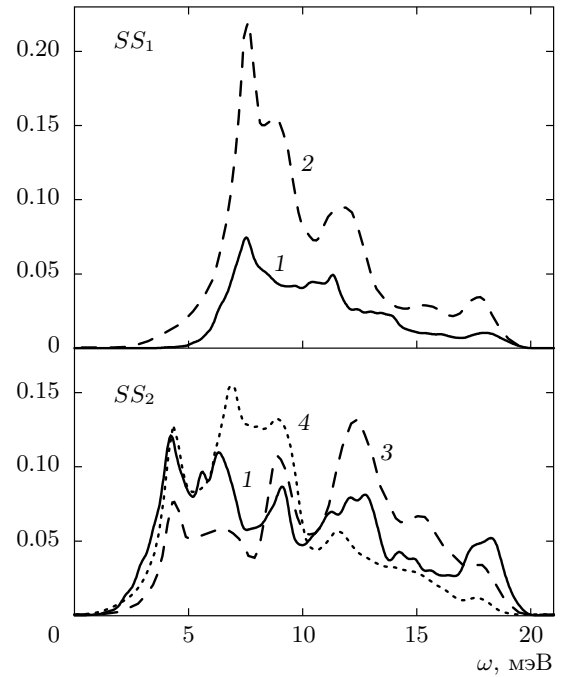
На рис. 3 показаны рассчитанные функции Элиашберга для незанятого ( $SS_1$ ) и занятого ( $SS_2$ ) поверхностных состояний, а также локальные плотности поверхностных колебательных состояний. Видно, что функция  $\alpha^2 F(\omega)$  для незанятого состояния в основном определяется вкладами от рассеяния на  $Z$ -поляризованных модах, локализованных на первом атомном слое. В частности, наиболь-



**Рис. 2.** Электронная структура поверхности Ag(110): серая область соответствует проекции континуума объемных состояний серебра на поверхность (110); белая область —  $\bar{Y}$ -щель, содержащая незанятое ( $SS_1$ , штриховая линия) и занятое ( $SS_2$ , сплошная линия) поверхностные состояния. Стрелками показаны индуцированные фононами переходы возбужденных электронов из  $SS_1$  и дырок из  $SS_2$  в объемные состояния

ший пик при 7.5 мэВ соответствует рассеянию на рэлеевской поверхностной моде. Вычисленный согласно выражению (2) параметр ЭФВ для данного состояния составляет  $\lambda = 0.08$ . Как можно видеть из рис. 3 (для занятого состояния), функция Элиашберга определяется процессами рассеяния на  $Y$ -поляризованных колебаниях атомов первого слоя и  $Z$ -поляризованных фононных модах, локализованных на втором атомном слое поверхности. В целом, в отличие от предыдущего случая, спектральная функция занятого состояния более широкая и имеет несколько интенсивных пиков в низкочастотной области, что определяет существенно большее значение  $\lambda$  для данного состояния: для электронного возбуждения в точке  $\bar{Y}$  рассчитанный параметр ЭФВ  $\lambda = 0.28$ .

Оценка фононного вклада в затухание возбуждений в поверхностных состояниях на Ag(110) на основе анализа температурной зависимости данных спектроскопии генерации второй гармоники была предпринята в работе [17]. Определенный в данной работе наклон  $d\Gamma/dT = 0.072 \pm 0.014$  мэВ/К соответствует  $\lambda = 0.13 \pm 0.02$ . Однако нужно заметить, что в данном случае  $\Gamma_{e-ph}$ , как и полная ширина линии



**Рис. 3.** Функция Элиашберга  $\alpha^2 F(\omega)$  для незанятого ( $SS_1$ ) и занятого ( $SS_2$ ) поверхностных состояний (кривые 1) и локальные плотности локализованных на атомах первого и второго слоев фононных состояний  $F(\omega)$  с поляризациями  $Y$  и  $Z$ : 2 —  $F_{Z_1}(\omega)$ ; 3 —  $F_{Z_2}(\omega)$ ; 4 —  $F_{Y_1}(\omega)$

для переходов между поверхностными состояниями, полученная в данном эксперименте, включает в себя вклады от обоих поверхностных состояний и полученная величина  $\lambda$  представляет собой усредненное для двух поверхностных состояний значение, которое не позволяет определить скорости затухания в каждом конкретном состоянии. В целом можно отметить неплохое согласие средней величины наших рассчитанных значений  $\lambda$  для поверхностных состояний в точке  $\bar{Y}$  с измеренной величиной.

Рассчитанная для обоих поверхностных состояний зависимость  $\Gamma_{e-ph}$  от температуры показана на рис. 4. Видно, что в пределе нулевой температуры фононный вклад в скорость затухания квазичастичных возбуждений достаточно мал (2.4 и 6.4 мэВ соответственно для электронов и дырок), но уже при комнатной температуре он становится существенным: при 300 К  $\Gamma_{e-ph}$  составляет 13 и 45.5 мэВ соответственно для электронов и дырок, что значительно больше электрон-электронного вклада на поверхности Ag(111), составляющего 2 мэВ [38, 39]. Кроме того, разница в скоростях затухания возбужденных электронов и дырок, вызванного рассеянием на

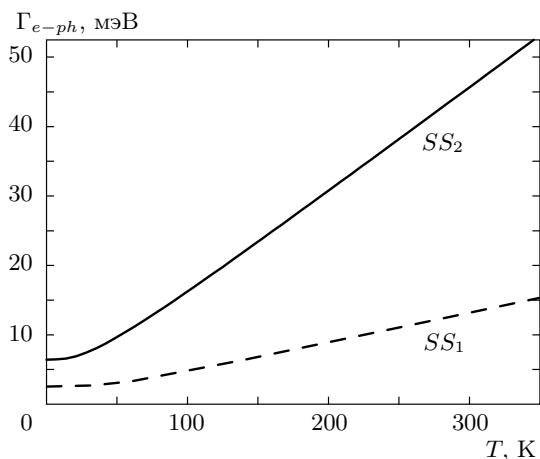


Рис. 4. Температурные зависимости ЭФВ-вклада в ширину линии поверхностных состояний в точке  $\bar{Y}$  для электронов (штриховая кривая) и дырок (сплошная)

фононах, сравнима с вкладом в уширение линии за счет рассеяния на поверхностных точечных дефектах, полученным, в частности, при комнатной температуре на поверхности Au(111) [13].

Различие в скоростях рассеяния возбужденных электронов и дырок определяется различной пространственной локализацией занятого и незанятого поверхностных состояний в точке  $\bar{Y}$ . Как видно из рис. 5, незанятое состояние локализовано над атомами первого слоя поверхности, т.е. на краю ступени, если рассматривать поверхность (110) как простейшую ступенчатую поверхность, в то время как максимум занятого состояния локализован над атомами второго слоя (или в углу ступени). Такая локализация поверхностных состояний и определяет различие в обусловленных фононами механизмах рассеяния квазичастиц на поверхности Ag(110): в рассеянии возбужденных электронов определяющую роль играют в основном Z-поляризованные моды, локализованные на атомах первого слоя (рис. 5a), тогда как рассеяние дырок в занятом поверхностном состоянии происходит благодаря как Z-поляризованным фононам второго слоя, так и колебаниям атомов первого слоя в Y-направлении (рис. 5б).

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы представили результаты сравнительного изучения электрон-фононного рассеяния возбужденных электронов и дырок в незанятом и занятом поверхностных состояниях

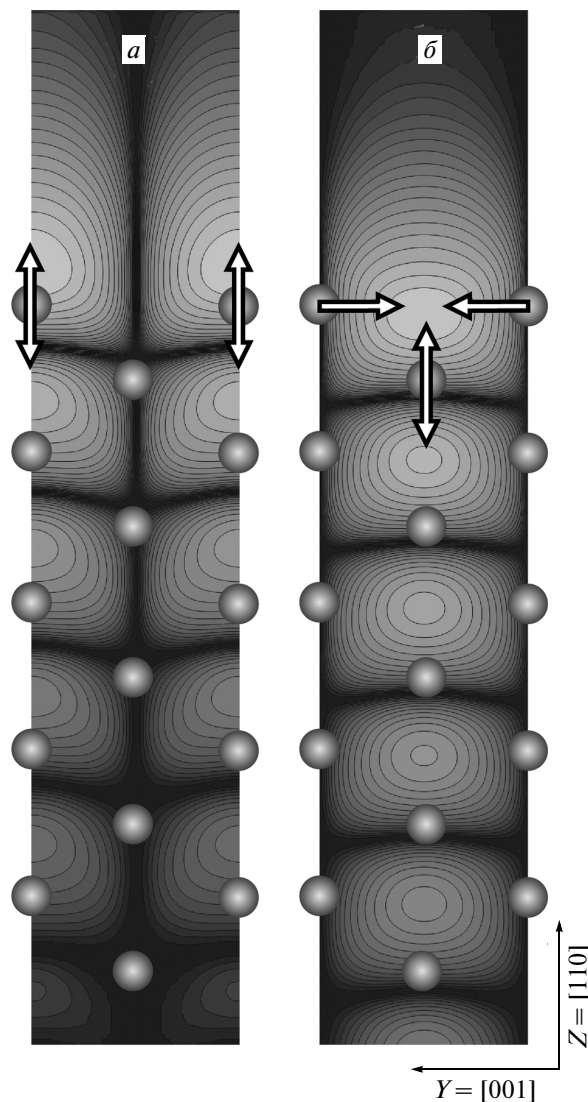


Рис. 5. Зарядовое распределение незанятого (a) и занятого (б) поверхностных состояний в точке  $\bar{Y}$ . Серые шарики соответствуют проекции атомов ГЦК-решетки на плоскости  $(1\bar{1}0)$ , перпендикулярную плоскости поверхности. Стрелками показаны Y- и Z-векторы поляризации поверхностных фононов, обеспечивающих рассеяние квазичастичных возбуждений

в точке  $\bar{Y}$  на поверхности Ag(110). Показано, что благодаря различной пространственной локализации поверхностных состояний в рассеянии электронов и дырок принимают участие различные поверхностные фононные моды, в результате чего параметр ЭФВ  $\lambda$  в незанятом поверхностном состоянии примерно в три раза меньше, чем в занятом поверхностном состоянии. Аналогичная картина

обусловленного фононами рассеяния возбужденных электронов и дырок будет наблюдаться и на поверхностях (110) других ГЦК-металлов, имеющих похожую электронную зонную структуру.

Численные расчеты выполнены на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете.

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. Bonn, S. Funk, Ch. Hess et al., *Science* **285**, 1042 (1999).
2. *Laser Spectroscopy and Photochemistry on Metal Surfaces*, ed. by H. L. Dai and W. Ho, World Sci., Publ. Comp., Singapore (1995).
3. W. Ho, *J. Phys. Chem.* **100**, 13050 (1996).
4. H. Nienhaus, *Surf. Sci. Rep.* **45**, 1 (2002).
5. C. D. Lindstrom and X.-Y. Zhu, *Chem. Rev.* **106**, 4281 (2006).
6. N. Memmel and E. Bertel, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 485 (1995).
7. M. Giesen, G. Schulze Icking-Konert, and H. Ibach, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3101 (1999).
8. P. M. Echenique, R. Berndt, E. V. Chulkov et al., *Surf. Sci. Rep.* **52**, 219 (2004).
9. E. V. Chulkov, A. G. Borisov, J. P. Gauyacq et al., *Chem. Rev.* **106**, 4160 (2006).
10. Ph. Hofmann, Y. Q. Cai, Ch. Grütter, and J. H. Bilgram, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1670 (1998).
11. J. E. Gayone, S. V. Hoffmann, Z. Li, and Ph. Hofmann, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 127601 (2003).
12. M. Fuglsang Jensen, T. K. Kim, S. Bengió et al., *Phys. Rev. B* **75**, 153404 (2007).
13. С. В. Еремеев, Е. В. Чулков, *ФТТ* **51**, 808 (2009).
14. R. Matzdorf, *Surf. Sci. Rep.* **30**, 153 (1998).
15. J. Kröger, *Rep. Progr. Phys.* **69**, 899 (2006).
16. Ph. Hofmann, I. Yu. Sklyadneva, E. D. L. Rienks, and E. V. Chulkov, *New J. Phys.* **11**, 125005 (2009).
17. S. M. Dounce, M. Yang, and H.-L. Dai, *Phys. Rev. B* **67**, 205410 (2003).
18. P. Straube, F. Pforte, T. Michalke et al., *Phys. Rev. B* **61**, 14072 (2000).
19. G. A. Somorjai, in: *Elementary Reaction Step in Heterogeneous Catalysis*, ed. by R. W. Joyner and R. A. Van Santen, Kluwer, Dordrecht (1993), p. 3.
20. Г. М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **38**, 966 (1960).
21. Е. Г. Максимов, Д. Ю. Саврасов, С. Ю. Саврасов, *УФН* **167**, 353 (1997).
22. A. Eiguren, B. Hellsing, E. V. Chulkov, and P. M. Echenique, *Phys. Rev. B* **67**, 235423 (2003).
23. B. Hellsing, A. Eiguren, and E. V. Chulkov, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 5959 (2002).
24. С. В. Еремеев, Г. Г. Русина, С. Д. Борисова, Е. В. Чулков, *ФТТ* **50**, 311 (2008).
25. S. V. Eremeev, I. Yu. Sklyadneva, P. M. Echenique et al., *Surf. Sci.* **601**, 4553 (2007).
26. S. Mathias, S. V. Eremeev, E. V. Chulkov et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026802 (2009).
27. M. S. Daw and M. I. Baskes, *Phys. Rev. B* **29**, 6443 (1984).
28. С. С. Циркин, С. В. Еремеев, Е. В. Чулков, *ФТТ* **52**, 175 (2010).
29. S. S. Tsirkin, S. V. Eremeev, and E. V. Chulkov, *Surf. Sci.* doi:10.1016/j.susc.2010.02.003.
30. E. V. Chulkov, V. M. Silkin, and P. M. Echenique, *Surf. Sci.* **437**, 330 (1999).
31. G. Bracco, R. Tatarek, F. Tommasini et al., *Phys. Rev. B* **36**, 2928 (1987).
32. R. Tatarek, G. Bracco, F. Tommasini et al., *Surf. Sci.* **211/212**, 314 (1989).
33. F. Stietz, G. Meister, A. Goldmann, and J. A. Schaefer, *Surf. Sci.* **339**, 1 (1995).
34. A. V. Bertsch, E. V. Chulkov, S. V. Eremeev et al., *Vacuum* **46**, 625 (1995).
35. R. Heid and K.-P. Bohnen, *Phys. Rep.* **387**, 151 (2003).
36. A. Goldmann, V. Dose, and G. Borstel, *Phys. Rev. B* **32**, 1971 (1985).
37. A. Gerlach, G. Meister, R. Matzdorf, and A. Goldmann, *Surf. Sci.* **443**, 221 (1999).
38. J. Kliewer, R. Berndt, E. V. Chulkov et al., *Science* **288**, 1399 (2000).
39. E. V. Chulkov, V. M. Silkin, and M. Machado, *Surf. Sci.* **482-485**, 693 (2001).