

ФОНОННЫЙ СПЕКТР СВЕРХРЕШЕТОК GaAs/AlAs: ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ

© В.А.Гайслер, Д.А.Тэннэ, Н.Т.Мошегов, А.И.Торопов,
А.П.Шебанин*, А.А.Яскин

Институт физики полупроводников

Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

*Объединенный институт геологии, геофизики и минералогии

Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Поступила в Редакцию 22 августа 1995 г.

В окончательной редакции 12 февраля 1996 г.)

Представлены результаты расчета фононного спектра сверхрешеток GaAs/AlAs с учетом неидеальности гетерограниц. Полученные результаты использованы для анализа данных комбинационного рассеяния света на акустических и оптических фононах в сверхрешетках GaAs/AlAs, выращенных в направлении (001). Решение обратной спектральной задачи позволяет по экспериментальным данным о частотах фононов в сверхрешетке определять совокупность ее структурных параметров: период, толщины слоев GaAs и AlAs, а также толщину переходного слоя на гетерограницах.

Фононный спектр полупроводниковых сверхрешеток (СР) интенсивно исследовался в последнее десятилетие как теоретически, так и экспериментально (обзор содержится в [1]). Его основные особенности (свертка ветвей акустических фононов, формирование интерфейсных и локализованных оптических фононов) хорошо изучены. Однако в большинстве работ для анализа фононного спектра использовались модели, описывающие идеальную СР с абсолютно резкими гетерограницами. Такой подход, позволяя анализировать общие закономерности фононного спектра СР, как правило, не дает хорошего согласия расчетных и экспериментальных значений частот фононов. Фононный спектр реальной СР, имеющей на гетерограницах переходные слои конечной толщины, существенно отличается от спектра идеальной СР. В первую очередь это относится к частотам оптических колебаний. В работах [2-4] продемонстрировано значительное изменение частот локализованных оптических фононов в слоях GaAs и AlAs при рассмотрении неидеальных гетерограниц.

В данной работе проведен расчет дисперсии акустических фононов в СР с учетом неидеальности гетерограниц. Приведены результаты

расчета частот локализованных оптических фононов в широком диапазоне изменения толщин слоев СР и толщин переходных слоев на гетерограницах. Проанализировано влияние асимметрии гетерограниц на частоты локализованных оптических фононов.

Полученные расчетные данные о частотах акустических и оптических фононов в СР (прямая спектральная задача) свидетельствуют о сильном влиянии разупорядоченности гетерограниц на фононный спектр в оптическом диапазоне, в то время как на частоты акустических фононов неидеальность гетерограниц оказывает очень слабое влияние. Следовательно, при решении обратной спектральной задачи (определении характеристик СР по значениям фононных частот) данные о локализованных оптических фононах могут быть использованы для определения как толщин слоев компонентов СР, так и толщин переходных слоев на гетерограницах. Значения частот свернутых акустических фононов могут использоваться для определения периода СР.

Результаты расчета фононного спектра СР использованы для анализа экспериментальных данных о частотах свернутых акустических и локализованных оптических фононов, полученных методом комбинационного рассеяния света (КРС) в ряде СР GaAs/AlAs с ориентацией (001). Описана процедура решения обратной спектральной задачи, продемонстрирована однозначность ее решения и проанализирована точность определения структурных параметров СР на основании данных КРС, которая сопоставима с точностью метода дифракции рентгеновских лучей и электронной микроскопии высокого разрешения [5].

1. Расчет частот свернутых акустических фононов в сверхрешетках GaAs/AlAs

Свертка ветвей акустических фононов в СР анализировалась многими авторами [1], однако, как правило, рассматривались СР с идеальными гетерограницами. Модель упругого континуума [6] дает следующее дисперсионное соотношение

$$\cos(qd) = \cos\left(\omega \frac{d_1}{V_1}\right) \cos\left(\omega \frac{d_2}{V_2}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_1 V_1}{\rho_2 V_2} + \frac{\rho_2 V_2}{\rho_1 V_1} \right) \sin\left(\omega \frac{d_1}{V_1}\right) \sin\left(\omega \frac{d_2}{V_2}\right). \quad (1)$$

Здесь d_1 и d_2 — толщины слоев GaAs и AlAs; $d = d_1 + d_2$; ρ_1, ρ_2, V_1, V_2 — плотности и скорости звука для соответствующих материалов, q — волновой вектор, ω — частота фонона.

Для описания СР с неидеальными гетерограницами используем модель линейной цепочки, в которой каждый катионный слой может содержать атомы как Ga, так и Al. Вероятности заполнения i -го катионного слоя соответствующими атомами обозначим $P_{\text{Ga},i}$ и $P_{\text{Al},i}$ ($P_{\text{Ga},i} + P_{\text{Al},i} = 1$). Под d_1 (d_2) будем понимать толщину слоя, в котором вероятность P_{Ga} (P_{Al}) более 0.5. Уравнения движения для i -го катионного слоя записываются в виде

$$m_{1,i} \omega^2 u_{1,i} = \beta_i (2u_{1,i} - u_{2,i+1} - u_{2,i}), \quad (2)$$

где $u_{1,i}$ — смещение i -го катионного слоя, $u_{2,i+1}$ и $u_{2,i}$ — смещение соседних слоев атомов As, m_{Ga} , m_{Al} — массы атомов Ga и Al,

$m_{1.i} = m_{\text{Ga}}P_{\text{Ga}.i} + m_{\text{Al}}P_{\text{Al}.i}$. Силы постоянны β_i определяются аналогичным образом: $\beta_i = \beta_{\text{Ga}}P_{\text{Ga}.i} + \beta_{\text{Al}}P_{\text{Al}.i}$. Величины β_{Ga} и β_{Al} для случая продольных акустических фононов могут быть определены следующим образом: $\beta = 2a_0C_{11}$, где C_{11} — компонента тензора упругости соответствующего материала, a_0 — постоянная кристаллической решетки.

Уравнения движения для анионных слоев записываются аналогично

$$m_2\omega^2 u_{2,i} = \beta_{i-1}(u_{2,i} - u_{1,i-1}) + \beta_1(u_{2,i} - u_{1,i}). \quad (3)$$

Таким образом, СР, имеющая период из N монослоев, описывается системой $2N$ уравнений вида (2), (3), которая легко преобразуется в систему из N уравнений подстановкой (3) в (2). При решении используется условие периодичности

$$u_{i+N} = u_i \exp(iqd). \quad (4)$$

Дисперсионная зависимость для акустических фононов определяется из условия равенства нулю детерминанта полученной системы из N уравнений движения

$$|D_{ij}| = 0. \quad (5)$$

Для описания переходного слоя на гетерограницах, следуя [2,4], воспользуемся функцией ошибок, так что вероятность заполнения катионных слоев атомами Ga вблизи гетерограницы задается выражением

$$P_{\text{Ga}}(z) = [1 + \text{erf}(z/W)]/2. \quad (6)$$

Координата z здесь отсчитывается от граничного слоя атомов As, W — толщина переходного слоя. При $W = 0$ (идеальная СР) дисперсия акустических фононов, получаемая при решении уравнения (5), полностью совпадает с дисперсией, задаваемой континуальной моделью (1).

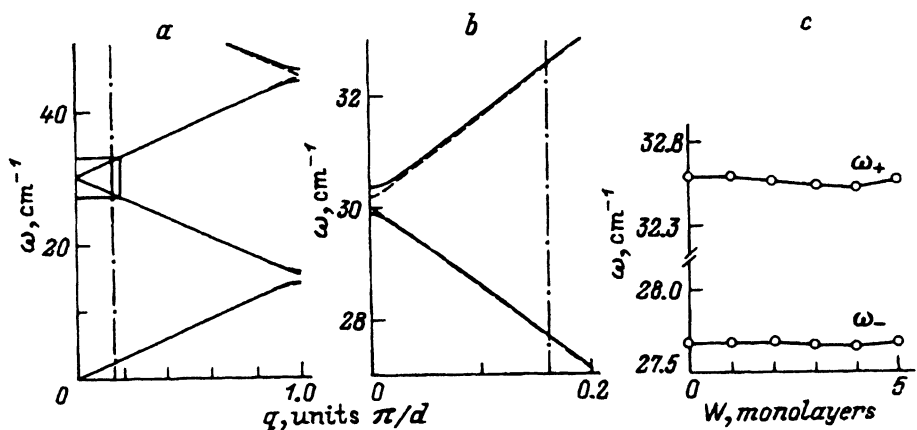


Рис. 1. а) Дисперсия продольных акустических фононов в СР $(\text{GaAs})_{10}(\text{AlAs})_{10}$, рассчитанная при $W = 0$ (сплошная линия) и 4 (штриховая линия). б) Участок первого дублета в увеличенном масштабе. в) Зависимость частот первого дублета свернутых LA-фононов в СР $(\text{GaAs})_{10}(\text{AlAs})_{10}$ от толщины переходного слоя.

Вертикальные штрихпунктирные линии (а, б) соответствуют значениям волнового вектора $4\pi/\lambda$, задаваемым в процессе КРС.

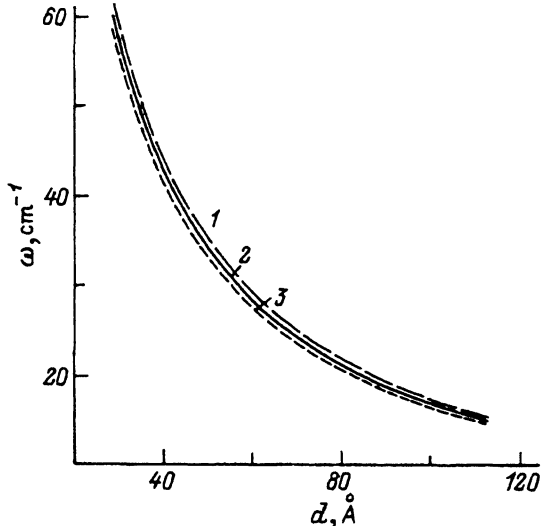


Рис. 2. Зависимость частоты $\langle \omega \rangle = (\omega_+ + \omega_-)/2$ для первого дублета свернутых LA-фононов от периода СР при различных отношениях $\alpha = d_1/d_2$.
 α : 1 — 0.5, 2 — 1, 3 — 2.

Проведенный нами в соответствии с (5) расчет дисперсии акустических фононов в СР для различных значений толщины переходного слоя W показывает, что частоты свернутых акустических фононов практически не зависят от параметра W . На рис. 1, *a, b* приведены дисперсионные зависимости для LA-фононов в СР $(\text{GaAs})_{10}(\text{AlAs})_{10}$, рассчитанные для значений $W = 0$ и 4. Видно, что влияние неидеальности гетерограниц существенно только в центре и на границе мини-зоны Бриллюэна (размытие гетерограниц приводит к уменьшению целей в дисперсии). В спектрах КРС в геометрии обратного рассеяния проявляются фононы с волновым вектором $q \sim 4\pi n/\lambda$ (λ — длина волны падающего света, n — показатель преломления). При таких значениях волнового вектора частоты свернутых акустических фононов изменяются лишь на уровне сотых долей обратного сантиметра даже при значительном увеличении толщины переходной области (см. рис. 1, *c*, на котором приведена подробная зависимость частот пиков первого дублета свернутых LA-фононов ω_- и ω_+ , регистрируемых в спектрах КРС, от толщины переходного слоя W).

Основным параметром, определяющим значения частот свернутых акустических фононов в СР, является ее период d . Зависимость частот ω_+ и ω_- от периода определяется выражением

$$\omega = \left(\frac{2\pi m}{d} \pm q \right) V_{\text{SL}}, \quad (7)$$

где V_{SL} — скорость звука в СР, m — порядковый номер дублета. Следует отметить, что на частоты свернутых акустических фононов оказывает некоторое влияние также отношение $\alpha = d_1/d_2$, поскольку V_{SL} в выражении (7) определяется через скорости звука объемных кристал-

$$V_{SL} = ((V^{-1}))^{-1} = \left[\frac{1}{d} \left(\frac{d_1}{V_1} + \frac{d_2}{V_2} \right) \right]^{-1} = \frac{(\alpha + 1)V_1V_2}{V_1 + \alpha V_2}. \quad (8)$$

На рис. 2 приведены зависимости частоты $\langle \omega \rangle = (\omega_+ + \omega_-)/2$ от периода для различных значений фактора α . Эти зависимости остаются неизменными для различных толщин переходного слоя.

2. Расчет спектра локализованных оптических фононов в сверхрешетках GaAs/AlAs

Частоты локализованных оптических фононов в СР рассчитывались с использованием модели линейной цепочки, в которой учитывалось взаимодействие атомов с ближайшими и следующими за ними соседями. Детально эта методика описана в [4]. Для каждого катионного узла записывались два уравнения движения для атомов Ga и Al с весовыми вкладами P_{Ga} и P_{Al} . Таким образом, для СР с периодом из N монослоев записывалась система из $3N$ уравнений ($2N$ — для катионных и N — для анионных слоев). Условие равенства нулю детерминанта этой системы дает частоты локализованных оптических фононов. Силовые константы, входящие в уравнения движения, определялись из экспериментальных данных о частотах фононов объемных кристаллов GaAs и AlAs [7,8]. Переходные слои на гетерограницах описывались, как и в случае акустических фононов, выражением (6).

Результаты расчета частот нечетных локализованных LO -фононов в GaAs, наблюдаемых в спектрах нерезонансного КРС в СР GaAs/AlAs с ориентацией (001), приведены на рис. 3, а-с. Эти частоты зависят от двух параметров: d_1 и W . Из этого рисунка видно существенное уменьшение частот LO_{1-} , LO_{3-} и LO_{5-} мод с увеличением толщины переходного слоя W для значений $d_1 > 7$ монослоев. При d_1 , равном 6 и 5 монослоям, частота фонона LO_5 увеличивается с ростом W .

Значительное изменение частот локализованных оптических фононов в зависимости от толщины переходного слоя может быть прокомментировано следующим образом. Наличие переходных слоев на гетерограницах приводит к тому, что локализация фонона происходит в слое, содержащем как чистый GaAs, так и области твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$. Известно [9], что при малых волновых векторах частота GaAs-моды твердого раствора уменьшается с ростом концентрации Al. Этим обусловлено уменьшение частот локализованных оптических фононов с ростом W . Однако при значениях волнового вектора $q > 0.8\pi/a_0$ в растворе происходит увеличение частоты GaAs LO -моды с ростом x [9], т.е. при таких волновых векторах $Al_xGa_{1-x}As$ частота LO -фонона выше, чем в чистом GaAs. Локализованный в слое GaAs толщиной d_1 оптический фонон с порядковым номером m имеет частоту, равную частоте фонона объемного материала при значении волнового вектора $m\pi/(d_1 + \delta)$ [1] (δ — глубина проникновения фонона в слой AlAs, принимаемая обычно равной ~ 1 монослою). Если это значение попадает в область увеличения частоты с ростом x , как в случае

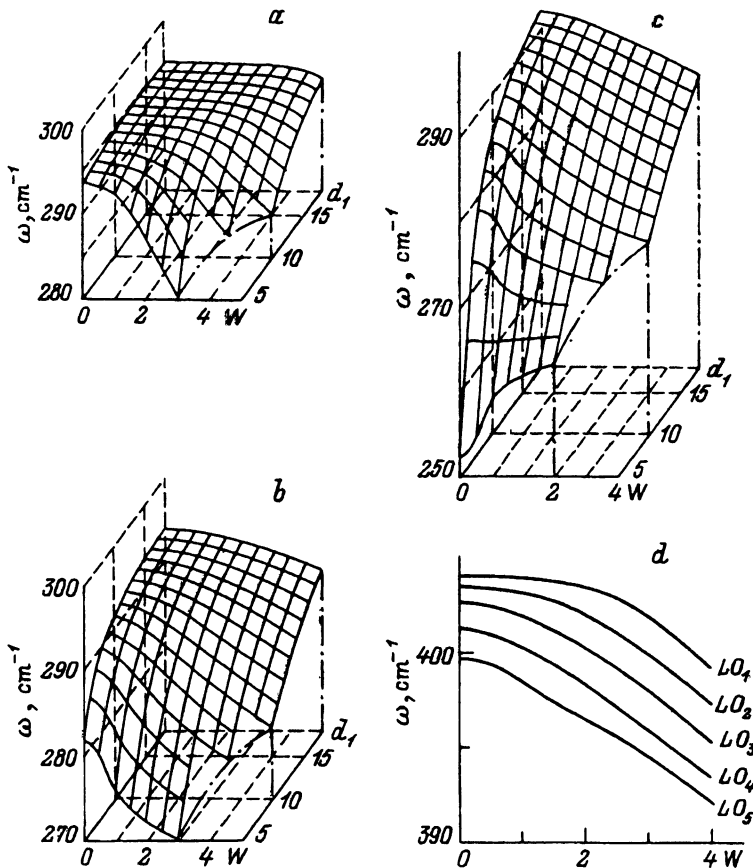


Рис. 3. Зависимости частот локализованных GaAs фононов LO_1 (a), LO_3 (b) и LO_5 (c) от толщины слоя GaAs d_1 и толщины переходного слоя W .

d) — зависимость частот локализованных AlAs LO-фононов в CP $(\text{GaAs})_9(\text{AlAs})_9$ от толщины переходного слоя W . Параметры d_1 и W приведены в единицах монослоев (1 монослой = 0.283 нм).

моды LO_5 в CP с толщинами слоев GaAs 5 и 6 монослоев, то увеличение толщины переходного слоя W приводит к возрастанию частоты локализованного оптического фонона.

Частоты фононов, локализованных в слоях AlAs, тоже существенно изменяются с ростом параметра W . На рис. 3,d представлены результаты расчета частот LO-фононов локализованных в AlAs, в CP $(\text{GaAs})_9(\text{AlAs})_9$ в зависимости от W . Следует отметить, что в отличие от GaAs частоты локализованных AlAs LO-фононов всегда уменьшаются с ростом W , что связано с тем, что частота AlAs-моды твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ снижается с ростом x для всех значений волнового вектора [9].

В реальной CP профили гетерограниц GaAs-AlAs (переход от GaAs к AlAs в процессе роста) и AlAs-GaAs (рост GaAs на AlAs) могут отличаться [10]. Нами просчитано влияние асимметрии профилей гетерограниц на частоты локализованных оптических фононов. На рис. 4

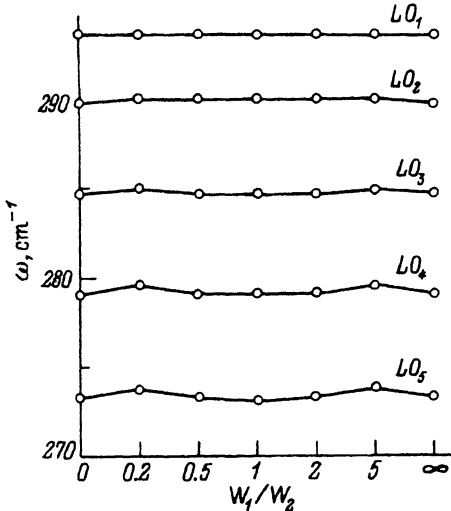


Рис. 4. Рассчитанные частоты локализованных GaAs LO-фононов в СР $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ в зависимости от отношения толщин переходных слоев на гетерограницах GaAs-AlAs и AlAs-GaAs.

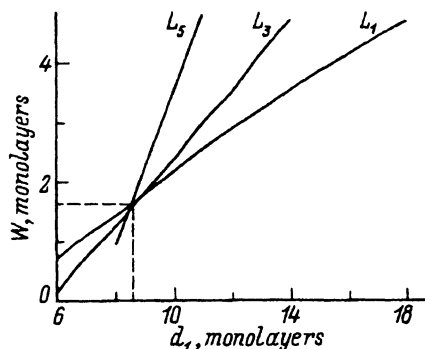


Рис. 5. Иллюстрация решения обратной спектральной задачи: определение параметров d_1 и W по данным КРС о частотах локализованных фононов.

приведена зависимость частот локализованных GaAs LO-мод в СР $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ от отношения W_1/W_2 , описывающего асимметрию профилей гетерограниц GaAs-AlAs и AlAs-GaAs с толщинами переходных слоев W_1 и W_2 соответственно. Расчет осуществлялся при условии $W_1 + W_2 = \text{const} = 3$ монослоя. Как видно из рис. 4, влияние асимметрии гетерограниц на частоты локализованных оптических фононов незначительно, и фактором, определяющим эти частоты, является усредненное значение $\langle W \rangle = (W_1 + W_2)/2$. Далее в статье под W подразумевается среднее значение $\langle W \rangle$.

3. Обратная спектральная задача

Решение обратной спектральной задачи, т.е. определение структуры характеристик СР по данным о частотах фононов, основывается на результатах, изложенных в предыдущих разделах.

Как показано в разделе 2, частоты акустических фононов СР практически не зависят от резкости гетерограниц; основным структурным фактором, определяющим их частоты, является период СР d . Таким образом, данные о частотах свернутых акустических фононов, получаемые методом КРС, могут быть использованы для точного определения периода. Требующееся для этого значение d_1 может быть получено из данных о локализованных оптических фононах (см. далее), после чего период определяется с помощью выражения (7). Однозначность определения периода следует из монотонности зависимости частот свернутых акустических фононов от d (рис. 2).

Зависимости частот локализованных GaAs LO-фононов от толщины слоя GaAs d_1 и толщины переходного слоя W , представленные на рис. 3, а-с, позволяют определять эти два параметра по данным о фоновых частотах. Определение производится следующим образом.

Экспериментальному значению частоты LO_1 -моды с использованием зависимости $\omega_{LO_1}(d_1, W)$ (рис. 3,а) ставится в соответствие ряд величин d_1 и W . В системе координат d_1 и W эти величины образуют линию L_1 , соответствующую данной частоте LO_1 . Аналогично для экспериментального значения частоты фонона LO_3 , пользуясь функцией $\omega_{LO_3}(d_1, W)$ (рис. 3,б), получаем другой набор значений d_1 и W , образующий линию L_3 . Пересечение линий L_1 и L_3 на плоскости (d_1, W) задает конкретные значения d_1 и W , характеризующие данную СР.

Экспериментальные данные о частоте LO_5 позволяют построить в системе координат (d_1, W) еще одну линию L_5 , задающую набор допустимых значений d_1 и W для этой частоты. В идеальном случае все три линии (L_1 , L_3 и L_5) должны пересекаться в одной точке. Реально их пересечение образуют вершины треугольника, размер которого позволяет судить о точности определения параметров d_1 и W . Сказанное иллюстрирует рис. 5, для построения которого использовались следующие данные КРС на локализованных LO -фононах в СР $(GaAs)_8(AlAs)_3$ (8 монослоев GaAs и 3 монослоя AlAs — номинальные значения, заданные в процессе выращивания образца методом молекулярно-лучевой эпитаксии): $\omega_{LO_1} = 293.6 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{LO_3} = 285.7 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{LO_5} = 274.8 \text{ см}^{-1}$. Линии L_1 , L_3 и L_5 , построенные на основании приведенных значений частот и зависимостей $\omega_{LO_i}(d_1 < W)$ (рис. 4), пересекаются на плоскости (d_1, W) , образуя треугольник, положение которого задает значения $d_1 = 8.5$, $\langle W \rangle = 1.6$ монослоя.

Аналогичная процедура определения толщины слоя AlAs d_2 и W может быть осуществлена на основе экспериментальных значений частот фононов, локализованных в слое AlAs. Однако разрешение в спектрах КРС локализованных AlAs LO -фононов, как правило, затруднено вследствие слабой дисперсии LO -фононов AlAs и наличия в спектрах интенсивной особенности интерфейсных фононов [11]. Параметр d_2 может определяться как разность d и d_1 .

Рис. 6,7 иллюстрируют решение обратной спектральной задачи для реальных образцов СР. Нами проанализированы данные КРС для большого количества образцов СР, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на установках, разработанных в ИФП СО РАН, и на установке RIBER-32P.

На рис. 6,а, б приведены спектры КРС на свернутых акустических фононах двух образцов СР, выращенных на установке RIBER-32P, один из которых выращивался без вращения подложки в процессе роста (а), другой — с вращением (б). Спектры были записаны в ряде точек поверхности образца. На основании этих данных построены зависимости периода d от координаты для этих образцов (рис. 6,с). Видно, что вращение подложки существенно повышает однородность периода по площади образца.

Значение периода d , определяемое нами из данных КРС, находится в хорошем соответствии с данными дифракции рентгеновских лучей для тех же образцов [12].

На рис. 7,а представлены спектры КРС на локализованных GaAs LO -фононах для трех образцов СР с различными толщинами слев. В соответствии с описанной методикой определены параметры d_1 и W , результаты представлены на рис. 7,б. При росте этих образцов были заданы следующие значения толщины слоев GaAs: 8 монослоев для

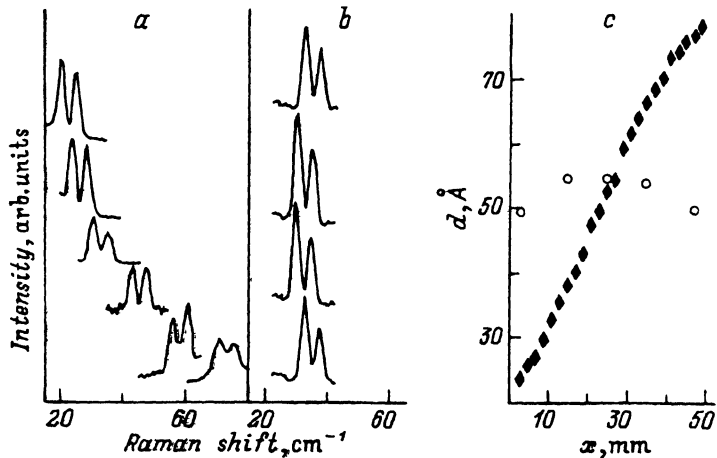


Рис. 6. Спектры КРС на свернутых LA-фононах в CP $(\text{GaAs})_9(\text{AlAs})_9$, выращенных без вращения (а) и с вращением подложки (б) в ряде точек вдоль диаметра образца.
с — зависимость периода CP от координаты для этих образцов: а — ромбы, б — кружки.

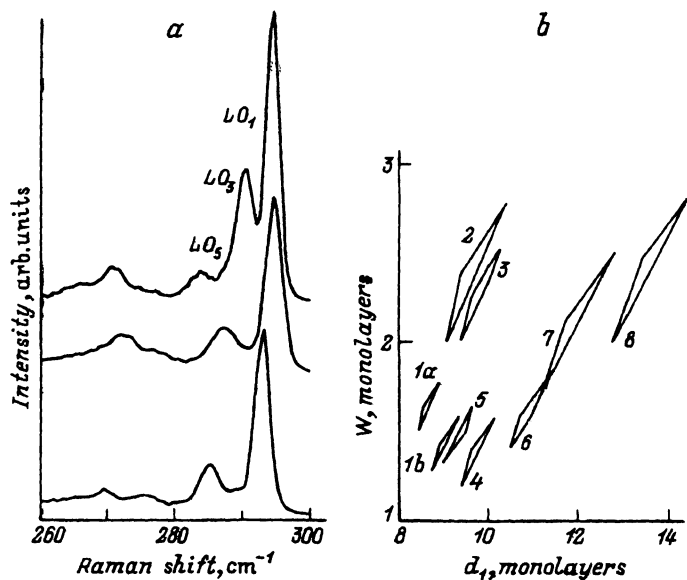


Рис. 7. Спектры КРС на оптических фононах GaAs для CP $(\text{GaAs})_{12}(\text{AlAs})_{12}$, $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ и $(\text{GaAs})_9(\text{AlAs})_9$ (а) и результаты определения параметров d_1 и W для ряда образцов (б).

образца № 1 (а, б); 9 монослоев для образцов № 2, 3 и 5; 10 монослоев для образца № 4; 11 и 12 монослоев для образцов № 6 и 7 соответственно (буквы а, б обозначают различные точки поверхности одного и того же образца). Небольшие отклонения значений d_1 , полученных из данных КРС, от номинальных могут быть вызваны неоднородностью образцов по площади (образцы выращивались без вращения подложки в процессе роста).

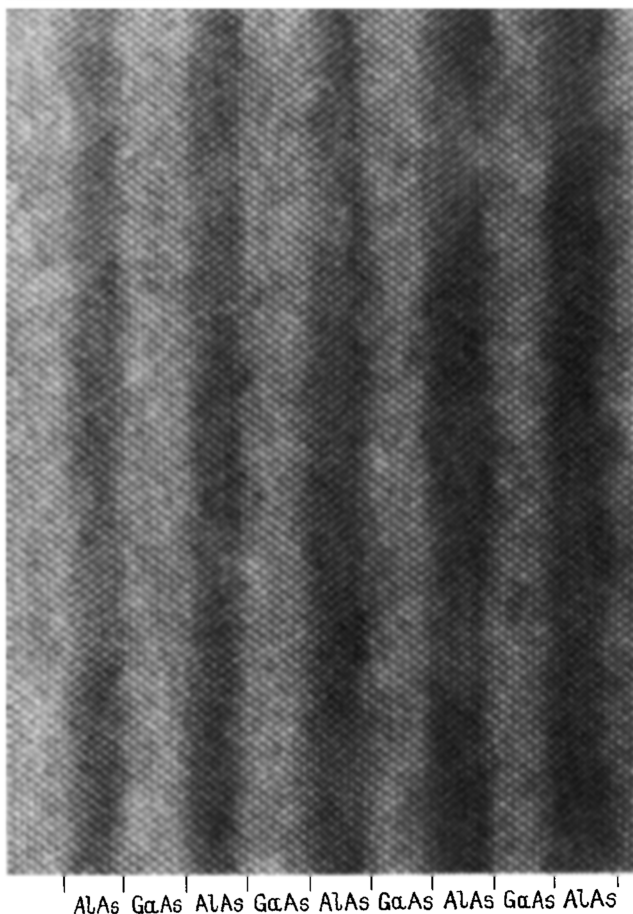


Рис. 8. Микрофотография поперечного среза СП $(\text{GaAs})_9(\text{AlAs})_9$. Светлые и темные полосы — слои GaAs и AlAs соответственно. Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения.

На рис. 8 приведена фотография, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения для образца № 5. Из спектров КРС, записанных в той же точке поверхности образца, получены следующие значения структурных параметров: $d = 18.3$, $d_1 = 9.3$, $d_2 = d - d_1 = 9$ и $W = 1.5$ монослоев (заштрихованный треугольник на рис. 7, *b*). Из рис. 8 видно, что значения d , d_1 и d_2 , определенные из данных КРС с помощью описанного метода, совпадают в пределах точности метода с данными электронной микроскопии. Что касается параметра W , то из фотографии, приведенной на рис. 8, трудно количественно определить ширину переходного слоя, однако значение $W = 1.5$ приблизительно соответствует степени разупорядоченности гетерограниц.

Точность определения структурных параметров СП оценивается нами как ~ 0.15 нм (0.5 монослоя). Эта величина получена с учетом точности определения частот фононов из экспериментов по КРС и погрешностей в расчетах прямой спектральной задачи.

Таким образом, в данной работе в рамках одной модели решена задача о расчете фононного спектра сверхрешеток GaAs/AlAs с учетом неидеальности гетерограниц. Показано, что наличие переходного слоя на гетерограницах не оказывает существенного влияния на частоты акустических фононов. Частоты локализованных оптических фононов, напротив, сильно зависят от толщины переходного слоя. При этом влияние асимметрии профиля гетерограниц на фононный спектр незначительно, и фактором, определяющим частоты локализованных оптических фононов, является значение толщины переходного слоя, усредненное по обеим гетерограницам.

Результаты проведенных расчетов позволяют решать обратную спектральную задачу — на основе экспериментальных данных о частотах фононов, полученных методом КРС, определять совокупность структурных параметров СР: период, толщины слоев GaAs и AlAs, толщину переходных слоев на гетерограницах. Данные электронной микроскопии высокого разрешения подтверждают, что предложенный метод пригоден для количественной характеристики параметров СР с высокой точностью.

Авторы выражают благодарность А.К.Гутаковскому за предоставление данных электронной микроскопии.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 95-02-04714-а), Международного научно-исследовательского фонда (грант NQR000) и совместного гранта МНФ и РФФИ NQR300.

Список литературы

- [1] Jusserand B., Gardona M. In: Light Scattering in Solids V / Ed. M.Cardona and G.Guntherodt. Springer. Heidelberg (1989). P. 49.
- [2] Jusserand B., Alexandre F., Paquet D., le Roux G. Appl. Phys. Lett. **47**, 301 (1985).
- [3] Molinari E., Baroni S., Giannozzi P., de Gironcoli S. Phys. Rev. **B 45**, 4280 (1992).
- [4] Samson B., Dumelow T., Hamilton A.A., Parter T.J., Smith S.R.P., Tilley D.R., Foxon C.T., Hilton D., Moore K.J. Phys. Rev. **B 46**, 2375 (1992).
- [5] Ikarashi N., Baba T., Ishida K. Appl. Phys. Lett. **62**, 1632 (1993).
- [6] Colvard C., Gant T.A., Klein M.V., Merlin R., Fisher R., Morkoc H., Gassard A.C. Phys. Rev. **B 31**, 2080 (1995).
- [7] Strauch D., Dorner B. J. Phys. Cond. Matter **2**, 1457 (1990).
- [8] Onton A., Chicotka R.J. Phys. Rev. **B 10**, 591 (1974).
- [9] Baroni S., de Gironcoli S., Giannozzi P. Phys. Rev. Lett. **65**, 84 (1990).
- [10] Tanaka M., Sakaki H., Yoshino J., Furuta T. Surf. Sci. **174**, 65 (1986).
- [11] Гайслер В.А., Тяннэ Д.А., Мошегов Н.Т., Торопов А.И., Мараховка И.И., Шебанин А.П. Письма в ЖЭТФ **61**, 371 (1995).
- [12] Гайслер В.А., Тяннэ Д.А., Мошегов Н.Т., Торопов А.И., Шебанин А.П., Номероцкий Н.В. Письма в ЖТФ **17**, 84 (1991).