

# Эффект больших доз в рентгеновских $\text{Si } L_{2,3}$ -эмиссионных спектрах при имплантации кремния ионами железа в стационарном режиме

© Д.А. Зацепин, Э.З. Курмаев, И.Р. Шейн\*, В.М. Черкашенко, С.Н. Шамин, С.О. Чолах\*\*

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия

\* Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия

\*\* Уральский государственный технический университет,  
620002 Екатеринбург, Россия

E-mail: d\_zatsepin@ifmlrs.uran.ru

(Поступила в Редакцию 7 апреля 2006 г.)

Методом рентгеновской  $\text{Si } L_{2,3}$ -эмиссионной спектроскопии (электронный переход  $3d3s \rightarrow 2p$ ) исследован эффект больших доз (ЭБД) в образцах кремния с проводимостью  $p$ - и  $n$ -типа, имплантированных ионами  $\text{Fe}^+$  в стационарном сканирующем режиме (энергия имплантации 100 keV, плотность ионного тока  $0.6\text{--}0.8 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ , дозы облучения от  $10^{14}$  до  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>). Выполнен анализ  $\text{Si } L$ -спектров посредством их сравнения со спектрами эталонов, проведено сопоставление с рентгеновскими спектральными данными по импульсной имплантации ионами  $\text{Fe}^+$ , а также их моделирование методом молекулярной динамики и полнопотенциальным методом присоединенных плоских волн (FLAPW). В результате установлены особенности проявления ЭБД при стационарном режиме внедрения ионов  $\text{Fe}^+$  в полупроводниковую кристаллическую матрицу, которые заключаются в более сильном разупорядочении структуры и частичной аморфизации образца от поверхности в объем по сравнению с импульсным ионным воздействием, однако рекристаллизация образца при достижении пороговой дозы облучения практически отсутствует. Обсуждаются наиболее вероятные причины и механизмы такого проявления ЭБД в исследованных образцах.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ (гранты № 05-02-16438 и 05-02-16448), гранта Минобразования — CRDF: Annex BF4M05, EK-005-X2 [REC-005], BRHE 2004 post-doctoral fellowship award Y2-EP-05-11, а также Совета по грантам Президента РФ для ведущих научных школ (грант НШ-4192.2006.2).

PACS: 71.20.Nr, 71.20.-b

## 1. Введение

Процессы имплантации полупроводникового кристаллического кремния ионами переходных металлов ( $\text{Fe}$ ,  $\text{Ni}$ ,  $\text{Co}$  и т.д.) представляют особую важность в связи с возможностью целенаправленного воздействия на его атомную структуру и формирования необходимых физико-химических свойств у этого широко используемого в современной микро- и нанoeлектронике материала. Возросший интерес к имплантации ионов  $3d$ -металлов в аморфные и кристаллические матрицы полупроводниковых материалов обусловлен тем, что образующиеся в структуре нанокластеры характеризуются повышенным магнитным моментом и коэрцитивной силой, сдвигом петли гистерезиса, а также многообразием других интересных магнитных и магнитооптических свойств [1]. Однако одновременно с формированием нанокластеров и необходимых физико-химических свойств у материала ионно-лучевое воздействие предполагает возникновение радиационно-стимулированных локальных нарушений (например, разрыв химических связей и образование агрегатов дефектов различных типов [2,3]), изменение зарядового состояния (валентности) атомов-компонентов [4] и как следствие возможное появление фазовой неоднородности в структуре объекта. Последнее в ряде случаев может крайне негативно влиять на

конструктивно-технологические факторы промышленного применения имплантированных материалов [5] и является серьезной проблемой. Помимо перечисленных следствий процесса имплантации совсем недавно было обнаружено еще одно — эффект больших доз (ЭБД), заключающийся в радиационно-стимулированной рекристаллизации полупроводникового кристаллического  $\text{Si}$ , разупорядоченного имплантацией ионами  $\text{B}^+$ ,  $\text{P}^+$ ,  $\text{As}^+$  (стационарная имплантация) [6] и  $\text{Fe}^+$  (импульсная имплантация) [7] при дозах, превышающих дозы аморфизации. К сожалению, природа и механизм ЭБД пока остаются до конца невыясненными.

Целью настоящей работы является продолжение исследований ЭБД методом рентгеновской спектроскопии в  $\text{Si } n$ - и  $p$ -типа, подвергнутом стационарной имплантации ионами  $\text{Fe}^+$ . Предварительные результаты, свидетельствующие о рентгеноспектральном проявлении ЭБД в полупроводниковом  $\text{Si}$  после импульсной имплантации ионами железа, приведены в нашей работе [7].

## 2. Методика приготовления образцов и описание эксперимента

Полированные диски монокристаллического кремния с поверхностью оптического качества имплантировались ионами  $\text{Fe}^+$  в стационарном сканирующем режиме.

Интегральный поток ускоренных ионов при облучении составлял от  $10^{14}$  до  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>. Для облучения применялся ионный источник IMSA-100 (Исследовательский центр г. Россендорфа, Германия), обеспечивающий следующие характеристики: энергия ионов 100 keV, плотность тока 0.6–0.8 μA/cm<sup>2</sup>, дозы имплантации от  $10^{14}$  до  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup>. Образцы кремния *n*- и *p*-типа облучались в течение 15 h 26 min, при этом температура образцов в процессе имплантации не превышала 40°C.

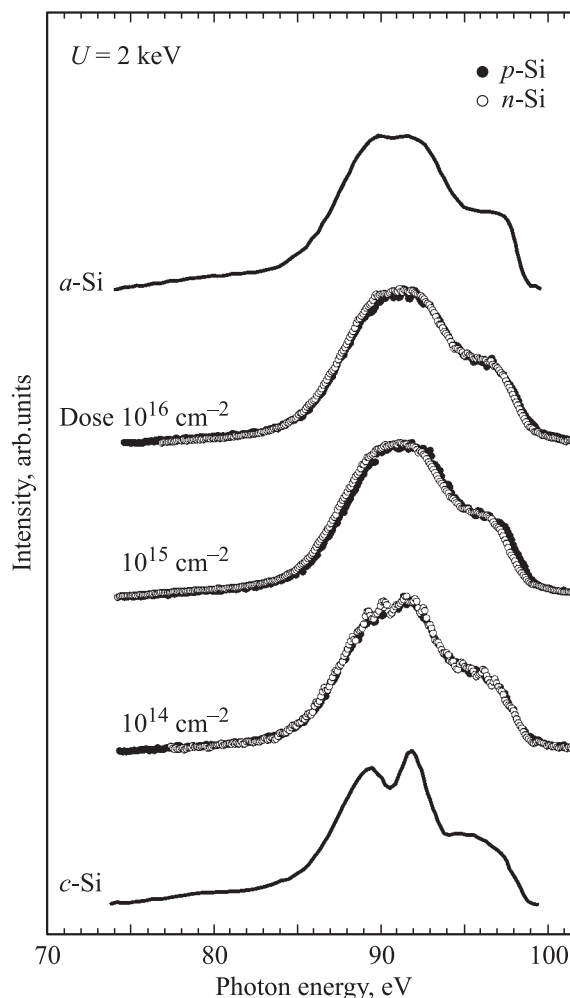
Рентгеноэмиссионные Si L<sub>2,3</sub>-спектры (валентный переход  $3d3s \rightarrow 2p_{3/2,1/2}$ ) имплантированных образцов и эталонов измерены с помощью ультрамягкого рентгеноэмиссионного спектрометра „Спектрозонд“ с высоким пространственным (4 μm) и энергетическим ( $E = 0.3$  eV) разрешением [8]. Данный спектрометр имеет дифракционную решетку  $R = 2$  m,  $N = 600$  штрихов на mm и использует электронное возбуждение рентгеновской эмиссии. При измерении рентгеновских спектров значения ускоряющего напряжения  $U$  варьировались от 2 до 6 keV с шагом 2 keV. Согласно [9], глубина анализируемого слоя в образце по Фельдману составляла  $\sim 1000$  Å ( $U = 2$  keV),  $\sim 3400$  Å ( $U = 4$  keV) и  $\sim 7200$  Å ( $U = 6$  keV).

Расчет зонной структуры кремния и моделирование рентгеновских эмиссионных спектров выполнялись *ab initio* методом молекулярной динамики (МД) с помощью пакета VASP-PAW [10–14] и полнопотенциальным методом присоединенных плоских волн (FLAPW, код WIEN2k) [15].

### 3. Результаты и обсуждение

Рентгеновская эмиссионная спектроскопия (РЭС) является одним из эффективных методов изучения зарядовых (валентных) состояний ионов в сложных многокомпонентных соединениях, обеспечивает информацию о распределении парциальных плотностей электронных состояний атомов-компонентов в валентной полосе и характере химической связи [16]. Развитие информационных методик РЭС привело к тому, что с помощью данного метода стало возможным исследовать фазовый состав материала, подвергнутого различным видам радиационного воздействия (см., например, работы [4,7]). Следовательно, применение РЭС в нашей ситуации является логически обоснованным.

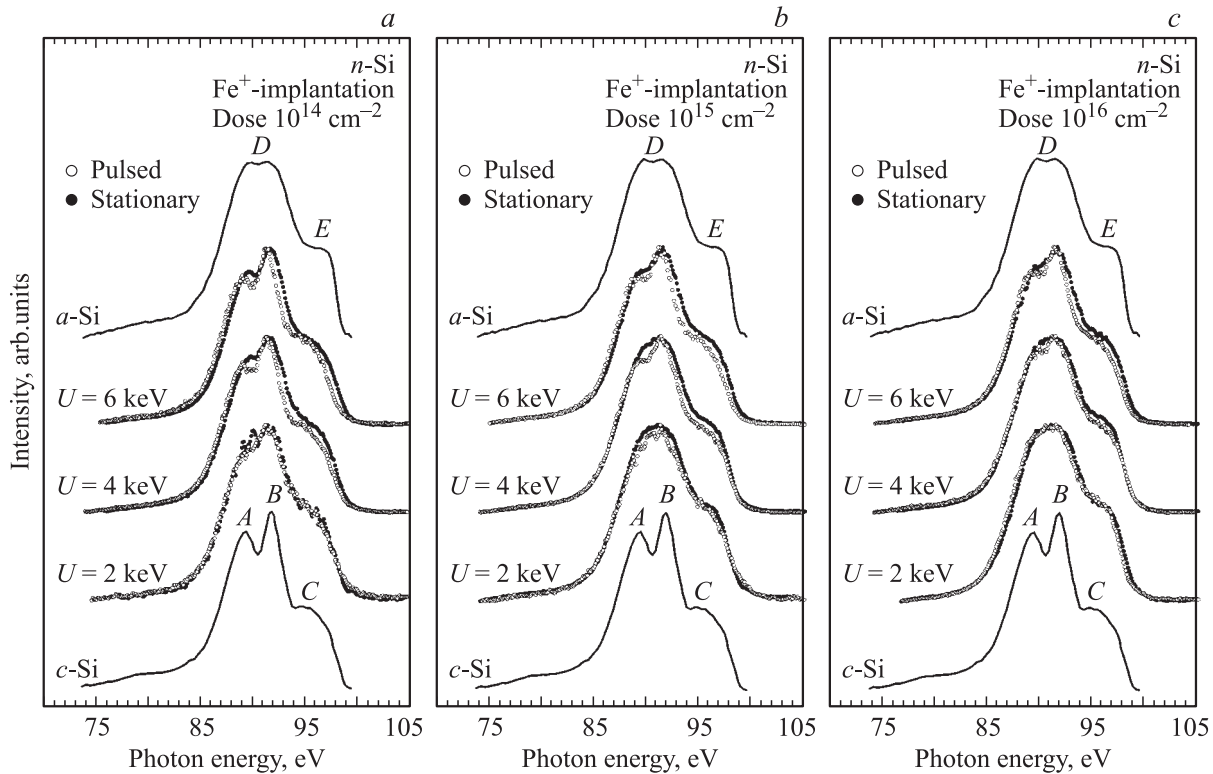
На рис. 1 приведено сравнение рентгеновских эмиссионных Si L<sub>2,3</sub>-спектров кремния, имплантированного ионами Fe в стационарном сканирующем режиме при дозах от  $10^{14}$  до  $10^{16}$  cm<sup>-2</sup> (показаны спектры, зарегистрированные при ускоряющем напряжении  $U = 2$  keV, поскольку именно в этом случае ЭБД проявляется в рентгеновской эмиссии наиболее сильно [7]). Так же как и после импульсной имплантации [7], мы не обнаружили существенных различий в рентгеновских спектрах имплантированного кремния *n*- и *p*-типов, т.е. проводимость материала не оказывает влияния на



**Рис. 1.** Сравнение рентгеновских эмиссионных Si L<sub>2,3</sub>-спектров имплантированного ионами Fe<sup>+</sup> кремния *n*- и *p*-типа, зарегистрированных при значении ускоряющего напряжения  $U = 2$  keV. Имплантация проведена в стационарном сканирующем режиме. Сплошными линиями показаны спектры эталонов (аморфного *a*-Si и кристаллического *c*-Si).

тонкую структуру Si L<sub>2,3</sub>-полос исследованных образцов. Поэтому дальнейший анализ результатов будем проводить, например, для образцов кремния *n*-типа. При этом основное внимание будет уделено различиям эволюции спектров кремния при стационарном и импульсных режимах имплантации.

На рис. 2, *a-c* приведено сравнение РЭС Si L<sub>2,3</sub> кремния *n*-типа, имплантированного ионами Fe<sup>+</sup> в стационарном сканирующем и импульсных режимах, со спектрами эталонов — кристаллического (*c*-Si) и аморфного (*a*-Si) кремния. Природа полос в спектрах эталонов и имплантированных образцов подробно описана в нашей работе [7]. Напомним, что РЭС Si L<sub>2,3</sub> возникает благодаря переходу электронов с 3*s*- и 3*d*-уровней на вакансии 2*p*-уровня и отображает вследствие дипольных правил отбора парциальные плотности 3*s*- и 3*d*-состояний, локализованных на атомах Si. Следовательно, максимумы



**Рис. 2.** Рентгеновские эмиссионные  $\text{Si } L_{2,3}$ -спектры кремния  $n$ -типа, подвергнутого имплантации ионами железа в импульсном и стационарном сканирующем режимах при дозах  $10^{14} - 10^{16} \text{ ions/cm}^2$ , и спектры эталонов (аморфного  $a$ -Si и кристаллического  $c$ -Si). Спектры получены при значениях ускоряющего напряжения  $U$  от 2 до 6 keV.

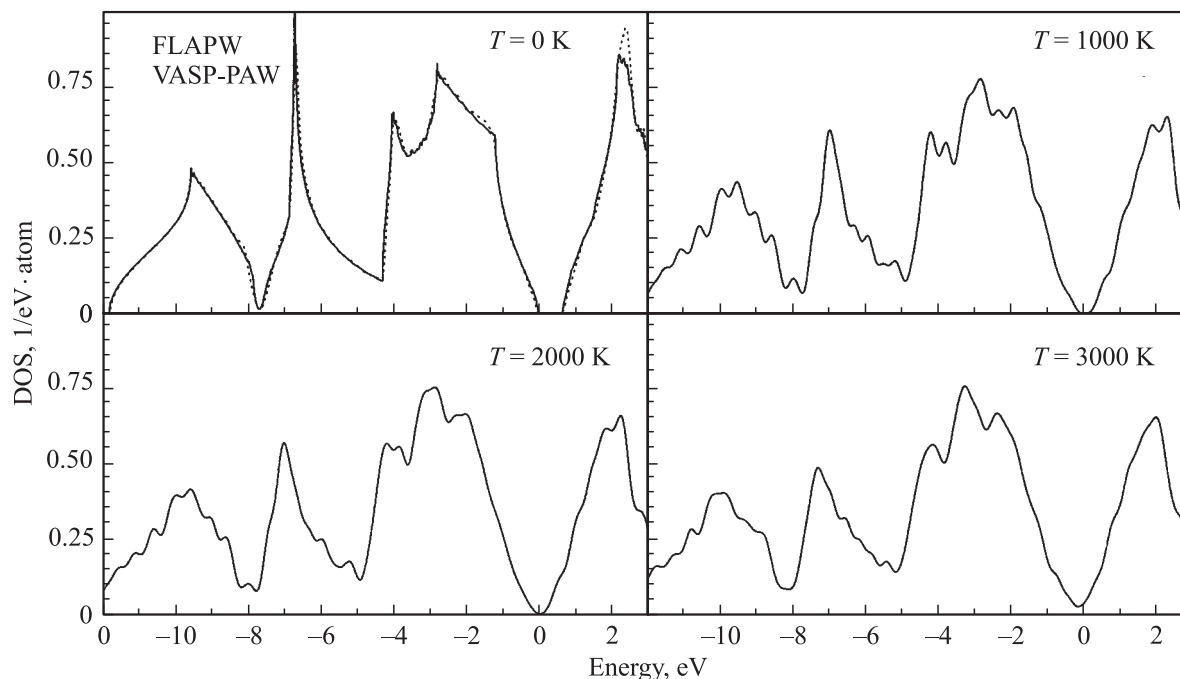
$A$  и  $B$  в спектре кристаллического  $c$ -Si, расположенные соответственно при  $\sim 89$  и  $\sim 92$  eV, обусловлены переходами  $3s$ -электронов на вакансию  $2p$ -уровня и обладают  $3s$ -природой. Широкая полоса  $C$  вблизи  $\sim 95$  eV отображает  $3d$ -состояния [7,9]. В случае аморфного  $a$ -Si имеет место широкий главный максимум  $D$ , расположенный при энергии фотонов  $\sim 91$  eV и характеризующий  $3s$ -состояния, а также слабоинтенсивное „плечо“  $E$  при  $\sim 96$  eV, отображающее  $3d$ -состояния.

Из рис. 2,  $a$  (показаны РЭС  $\text{Si } L_{2,3}$  кремния  $n$ -типа, полученные при значениях ускоряющего напряжения  $U = 2, 4$  и  $6$  keV; доза облучения  $10^{14} \text{ ions/cm}^2$ ) видно, что при изменении  $U$  от 2 до 6 keV не происходит существенной трансформации формы спектров импульсно имплантированного кремния. Аналогичное спектральное поведение справедливо и для спектров стационарно облученного Si. Вместе с тем отчетливо наблюдается изменение соотношения интенсивностей максимумов  $A$  и  $B$  в РЭС  $\text{Si } L_{2,3}$  как импульсно, так и стационарно имплантированных образцов (спектры последних проявляют более сильную тенденцию к вырождению двухпиковой структуры  $A-B$  в широкую полосу, характерную для аморфного  $a$ -Si). При этом наименьшее различие структур спектров импульсно и стационарно облученных образцов имеет место при  $U = 2$  keV.

Увеличение дозы имплантации от  $10^{14}$  до  $10^{16} \text{ ions/cm}^2$  усиливает вырождение двухпиковой струк-

туры  $A-B$  в „аморфноподобную“ широкую полосу  $D$  для обоих режимов имплантации (рис. 2,  $b, c$ ), однако подобная эволюция спектральной формы вновь более заметна для стационарно имплантированных образцов. Заметим, что в случае дозы имплантации  $10^{16} \text{ ions/cm}^2$  РЭС  $\text{Si } L_{2,3}$  импульсно и стационарно имплантированных образцов обладают минимальным различием спектральной формы. При ускоряющем напряжении 4 keV в спектре импульсно имплантированных образцов более четко проявляется тонкая структура главной полосы по сравнению со спектром  $\text{Si } L_{2,3}$  стационарно имплантированного кремния, а при  $U = 6$  keV спектры обеих групп образцов вновь приобретают двухпиковую структуру  $A-B$  подобно спектру  $c$ -Si. К сожалению, нам не удалось имплантировать образцы кремния в стационарном режиме с дозой облучения  $10^{17} \text{ ions/cm}^2$ , т.е. в таких условиях, при которых в случае импульсной имплантации наблюдается рекристаллизация вследствие ЭБД [7]. Тем не менее общая качественная картина изменения формы рентгеновских спектров при стационарной сканирующей имплантации позволяет предложить следующую интерпретацию полученных результатов.

Согласно данным нашей работы [7], вырождение двухпиковой структуры  $A-B$  в широкую  $D$ -подобную („аморфную“) полосу указывает на частичное разупорядочение и аморфизацию образца вследствие нарушения связей Si-Si за счет имплантации. При этом



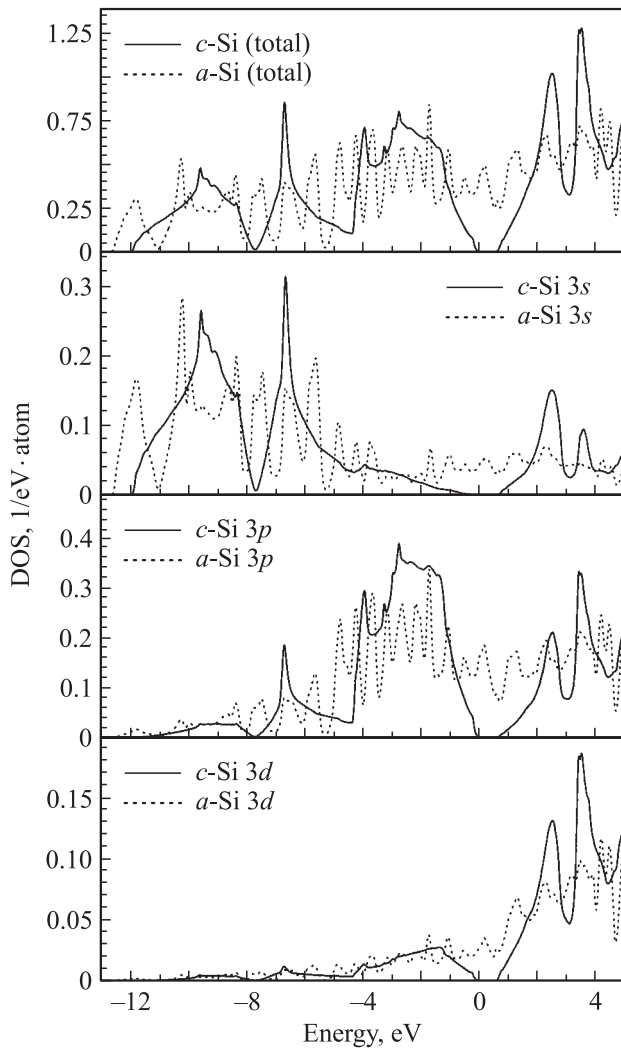
**Рис. 3.** Результаты моделирования *ab initio* методом молекулярной динамики полных плотностей состояний дефектного кристаллического кремния, усредненные по трем дефектным конфигурациям.

сравнение РЭС  $SiL_{2,3}$  импульсно и стационарно имплантированных образцов указывает на более сильные нарушения кристаллической структуры Si именно в случае стационарного сканирующего режима облучения. В пользу подобного предположения свидетельствует тот факт, что из-за вырождения двухпиковой структуры  $A-B$  спектры стационарно имплантированного Si при дозах от  $10^{15}$  до  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> в большей степени близки к спектрам аморфного  $a-Si$  (рис. 2, *b, c*). При увеличении ускоряющего напряжения  $U$  от 2 до 6 keV мы получаем информацию из более глубоких слоев объекта образца (см. раздел 2); из рис. 2 видно, что максимальная степень аморфизации имеет место лишь в приповерхностном слое глубиной  $\sim 1000$  Å, так как спектр при 2 keV наиболее близок к спектру  $a-Si$ . При максимальном  $U = 6$  keV ( $\sim 7200$  Å) спектры исследованных образцов достаточно близки по форме к спектру кристаллического кремния, т.е. вновь наблюдается характерная двухпиковая структура  $A-B$  главной полосы.

Поскольку ионная имплантация предполагает возникновение радиационных нарушений в материале (например, разрыв химических связей и образование агрегатов дефектов различных типов [2,3]), в имплантированном кремнии происходит существенная перестройка его кристаллической структуры из-за образования каскадов первично выбитых атомов (ПВА). Механизм такого явления продемонстрировали, например, авторы работ [17,18], в которых представлены результаты МД-расчетов по внедрению как единичных атомов Si с энергией 100 eV в аморфный кремний [17], так и различных кластеров кремния с энергией 5.7 keV в кристаллическую поверх-

ность Si(100) [18]. Приведенные в этих публикациях данные иллюстрируют сложную картину образования каскадов ПВА. Кроме того, существует большое число работ, в которых методами МД изучались энергии образования собственных дефектов и миграция атомов кремния как в кристаллическом, так и в аморфном и расплавленном кремнии (см., например, [19–23]). Как было показано в этих работах, механизмы дефектообразования, аморфизации, отжига и рекомбинации ПВА носят достаточно сложный и многоступенчатый характер, что существенно осложняет интерпретацию рентгеновских  $L_{2,3}$ -эмиссионных спектров для аморфного кремния.

Поэтому для выявления особенностей влияния собственных дефектов (вакансий и межузельных атомов) было выполнено компьютерное моделирование, которое проводилось в два этапа. Применялся *ab initio* метод МД с помощью пакета VASP-PAW [10–14] с учетом градиентной аппроксимации обменно-корреляционного потенциала [24] для ячейки кристаллического кремния, состоящей из 64 атомов с учетом четырех различных температур (0, 1000, 2000 и 3000 K) и трех различных конфигураций дефектов Френкеля (атом из узла кристаллической решетки помещался в свободное междоузлие за первую, вторую и третью координационную сферу) для каждой температуры. В течение 1500 шагов интегрирования для каждой температуры происходило термостатирование ячейки (принудительно поддерживалась заданная температура), затем режим термостатирования снимался и система начинала релаксировать. Число шагов интегрирования в этих случаях составляло 5000. При 0 K атомы кремния занимали позиции с ми-



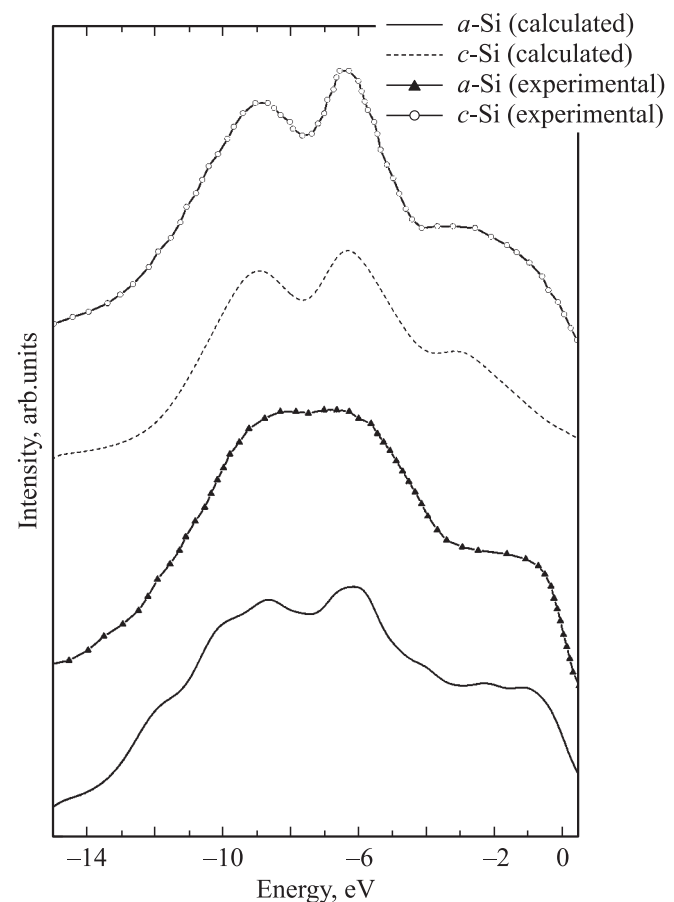
**Рис. 4.** Полная и частичная ( $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ) плотности электронных состояний Si, полученные усреднением двух дефектных конфигураций для восьмиатомной ячейки кремния, рассчитанные методом FLAPW.

нимумом полной энергии электронно-ядерной системы около первоначально заданной конфигурации дефектов. В случае ненулевой температуры происходила частичная рекомбинация дефектов Френкеля. Для полученных координат рассчитывались плотности электронных состояний, которые для каждой температуры усреднялись по всем трем конфигурациям дефектов.

Далее для более точного моделирования  $\text{Si } L_{2,3}$ -спектров рентгеновской эмиссии были рассчитаны кривые плотностей электронных состояний двух структур дефектного кремния, который моделировался восьмиатомной ячейкой. В расчете применялся электронно-потенциальный метод присоединенных плоских волн FLAPW (код WIEN2k [15] с учетом градиентной аппроксимации обменно-корреляционного потенциала [24]). При этом дефект Френкеля задавался следующими вариантами смещения атома кремния: а) из узла кристал-

лической решетки около междоузельной позиции в эту междоузельную позицию; б) из узла кристаллической решетки, расположенного во второй координационной сфере относительно междоузельной позиции, в эту междоузельную позицию. Для упомянутых дефектных конфигураций была проведена оптимизация координат атомов и параметров решетки. Полученные энергии Френкеля (4.32 и 3.84 eV для первой и второй конфигурации дефектов соответственно) хорошо совпадают с результатами расчетов, выполненных другими авторами (см., например, [19]). Для этих двух равновесных состояний дефектного кремния и усреднялись плотности электронных состояний, рассчитанные по методике [15].

На рис. 3 показаны результаты моделирования *ab initio* методом МД полных плотностей состояний (DOS) дефектного кристаллического кремния, усредненных по трем дефектным конфигурациям, как это было описано выше. Расчет показал, что при увеличении температуры происходит изменение формы плотностей состояний таким образом, что DOS становятся похожими на кривые плотностей состояний бездефектного кристаллического кремния. Данный факт можно трактовать



**Рис. 5.** Сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования рентгеновских  $\text{Si } L_{2,3}$ -эмиссионных спектров, полученных путем усреднения двух дефектных конфигураций для восьмиатомной ячейки кремния, выполненных в рамках метода FLAPW по методике, изложенной в работе [15].

следующим образом: при росте температуры в системе наблюдается рекомбинация собственных дефектов (т.е. смещенные в междоузельные позиции атомы кремния стремятся занять свои позиции в узлах кристаллической решетки). Весьма вероятно, что подобная рекомбинация и приводит к изменению спектров плотностей электронных состояний с увеличением температуры.

На рис. 4 представлены полная и парциальные ( $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ) плотности электронных состояний Si, полученные усреднением двух дефектных конфигураций для восьмиатомной ячейки кремния, рассчитанные методом FLAPW (см. выше). Из этого рисунка видно, что у кристаллического кремния (полупроводника) при образовании в его структуре дефектов появляются металлические свойства: исчезает энергетическая щель. Полученная в результате расчета структура плотностей электронных состояний (в том числе и переход полупроводник–металл) хорошо согласуется со структурой DOS, описанной авторами работы [23].

Рис. 5 демонстрирует сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования рентгеновских  $L_{2,3}$ -эмиссионных спектров, полученных путем усреднения двух дефектных конфигураций для восьмиатомной ячейки кремния, выполненных в рамках метода FLAPW по методике, изложенной в работе [15]. Из этого рисунка видно, что для дефектной структуры (по сравнению с идеальной кристаллической) рентгеновские эмиссионные спектры изменяют свою форму, а именно происходит вырождение двухпиковой структуры, характерной для кристаллического кремния, и образование одной широкой полосы. При этом форма линий, полученных в данной модели дефектного кремния, достаточно близка к форме спектра аморфного  $a$ -Si, т.е. на качественном уровне расчет корректно воспроизводит трансформацию рентгеновских эмиссионных  $Si L_{2,3}$ -спектров после нарушений кристаллической структуры вследствие ионной имплантации.

#### 4. Заключение

Таким образом, совокупность экспериментальных данных и результатов расчета методами МД позволяет утверждать, что причиной ЭБД в решетке имплантированного кремния являются разупорядочение кристаллической структуры Si вследствие разрыва связей Si–Si, образование агрегатных комплексов дефектов из смещенных в междоузлия атомов и рекристаллизация вследствие локального динамического отжига, который приводит к рекомбинации дефектных комплексов обратно на исходные кристаллографические позиции кристаллической структуры. Кроме того, установлено, что стационарный сканирующий режим имплантации производит более сильные нарушения кристаллической решетки Si (вне зависимости от типа проводимости данного материала) по сравнению с импульсным режимом имплантации. Последнее выражается в большей степени

аморфизации образцов при стационарном облучении, в этом случае эффект рекристаллизации при данной энергетике воздействия практически отсутствует.

#### Список литературы

- [1] F. Conella, P. Mazzoldi. Handbook on Nanostructured Materials and Nanotechnology / Ed. H.S. Nalwa. Academic Press, San Diego (2000). P. 81.
- [2] Э.З. Курмаев, Д.А. Зацепин, С.О. Чолах, В. Schmidt, Y. Harada, T. Tokushima, H. Osawa, S. Shin, T. Takeuchi. ФТТ **47**, 728 (2005).
- [3] С.В. Горбунов, Д.А. Зацепин, Э.З. Курмаев, Б. Шмидт, С.О. Чолах. Тез. XVII Рос. науч.-техн. конф. Изд-во УГТУ–УПИ, Екатеринбург (2005). С. 171.
- [4] D.A. Zatsepin, V.R. Galakhov, B.A. Gizhevskii, E.Z. Kurmaev, V.V. Fedorenko, A.A. Samokhvalov, S.V. Naumov. Phys. Rev. B **59**, 211 (1999).
- [5] В.Н. Черняев. Технология производства интегральных микросхем и микропроцессоров. Радио и связь, М. (1987). 463 с.
- [6] Д.И. Тетельбаум, А.И. Герасимов. ФТП **38**, 1301 (2004).
- [7] Д.А. Зацепин, Е.С. Яненко, Э.З. Курмаев, В.М. Черкашенико, С.Н. Шамин, С.О. Чолах. ФТТ **48**, 204 (2006).
- [8] E.Z. Kurmaev, V.V. Fedorenko, S.N. Shamin, A.V. Postnikov, G. Wiech, Y. Kim. Phys. Scr. T **41**, 288 (1992).
- [9] E.Z. Kurmaev, V.R. Galakhov, S.N. Shamin. Critical Rev. Sol. State Mater. Sci. **23**, 65 (1998).
- [10] G. Kresse, J. Hafner. Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
- [11] G. Kresse, J. Furthmuller. Comput. Mat. Sci. **6**, 15 (1996).
- [12] G. Kresse, J. Furthmuller. Phys. Rev. B **54**, 11 169 (1996).
- [13] D.M. Ceperley, B.L. Alder. Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [14] G. Kresse, J. Joubert. Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
- [15] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen. WIEN2k. An Augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties. Tech. Univ. Wien, Wien (2001).
- [16] А. Майзель, Г. Леонхард, Р. Сарган. Рентгеновские спектры и химическая связь. Наук. думка, Киев (1981) 419 с.
- [17] M. Koster, H.M. Urbassek. Phys. Rev. B **62**, 11 219 (2000).
- [18] S. Ihara, S. Itoh, J. Kitakami. Phys. Rev. B **58**, 10 736 (1998).
- [19] S. Goedecker, T. Deutsch, L. Billard. Phys. Rev. Lett. **88**, 235 501 (2002).
- [20] K. Nishihira, T. Motooka. Phys. Rev. B **66**, 233 310 (2002).
- [21] M. Posselt, F. Gao, D. Zwicker. Phys. Rev. B **71**, 245 202 (2005).
- [22] L.A. Marque's, L. Pelaz, J. Hernandez, J. Barbolla. Phys. Rev. B **64**, 045 214 (2001).
- [23] I.H. Lee, K.J. Chang. Phys. Rev. B **50**, 18 083 (1994).
- [24] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).