

# 흡착원자의 덮임율에 따른 Ag/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 의 구조 변화

정호진<sup>a</sup>, 정석민<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>연세대학교 물리학과, 서울 120-746

<sup>b</sup>전북대학교 물리학과, 전주 561-756

(2008년 8월 15일 받음, 2008년 9월 19일 수정, 2008년 9월 23일 확정)

제일원리계산 방법을 이용하여 Ag/Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (이후로  $\sqrt{3}$ -Ag로 표시) 표면에 은 원자가 추가로 흡착된 표면의 원자 구조와 에너지를 조사하였다. 은의 덮임율을 0.02 ML에서 0.14 ML로 변화시켜가며 구조변화를 살펴보았다. 흡착된 은 원자들은 대부분  $\sqrt{3}$ -Ag 표면의 은 원자층의 작은 삼각형(ST)의 중간에 자리 잡았다. 특이한 것은 은 원자들은 은 원자층 보다 아래로 내려간다는 것이다. 은 흡착원자(adatom)의 덮임율이 증가함에 따라 adatom들은 클러스터를 만들려는 경향을 보였다. 은 흡착원자들이 모인 클러스터의 에너지를 계산해 보면 흡착원자가 세 개일 때 가장 안정됨을 알 수 있었다. 이 삼원자 클러스터를 구성 단위로 하여  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  구조의 원자구조를 결정할 수 있었다. 각 덮임율에서 가장 에너지가 낮은 구조들에 대한 STM 영상을 시뮬레이션 해 보면 은 원자는 찬 상태에서 어렵게 보였다. 이는 은 원자가 기관으로 전하를 제공해 줌을 의미한다. 그리고 원자층의 구조변화가 STM 실험에서 보이는 미세한 특성까지도 잘 설명하였다.

주제어 : Ag/Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , 2차원 전자기체(2DEG), 흡착원자(adatom), 제일원리계산, 주사터널링현미경(STM)

## I. 서 론

2차원 전자기체(two-dimensional electron gas: 2DEG)에서는 양자홀효과와 전하밀도파(charge density wave)와 같은 저차원 양자역학적 현상이 많이 발견되기 때문에 2DEG는 물리학에서 상당히 중요한 역할을 해 왔다[1]. 일반적으로 2DEG는 띠틈(energy gap)이 다른 반도체를 접합하여 양자우물을 만들고 이 안에 전자를 가두어서 만든다[2,3].

그런데 Si(111)위에 Ag 1 ML를 흡착해서 얻은  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (앞으로  $\sqrt{3}$ -Ag라고 부름) 구조에 약간의 도핑을 하게 되면 표면에서 2DEG를 구현할 수 있게 된다[1,4-22]. 도핑 물질은 1가 금속인 알칼리 금속이나 귀금속으로 알려져 있다. 이들이 표면에 흡착되어 있을 때 표면 전자상태가 유도된다거나[6] 전자의 정상파 현상이 나타난다[9]. 그리고 도핑 물질의 흡착량이 0.14 ML에 이르게 되면  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ 이라는 새로운 주기성을 지닌 구조가 나타난다[7,16-22]. 특히 이 구조에서는 전기 전도도가 현저히 커지기 때문에 많은 관심을 끌고 있다[22]. 현재까지

는 주로 이 표면의 전자구조를 중심으로만 연구가 되었고 원자 구조에 대하여는 연구가 별로 없는 편이다. 특히 구조를 알 수 있는 계산 연구는 전무한 실정이다.

이번 연구에서는 제일원리 계산 방법으로  $\sqrt{3}$ -Ag 표면에 은 원자가 차례로 흡착될 때 원자 구조를 살펴본다. 은 원자의 덮임율(coverage)이 낮을 때는 은 원자는 기관의 은 원자층 아래로 내려가서 표면에 박히는 구조를 보여준다. 덮임율이 점점 늘어나면 은 흡착원자들끼리는 서로 모여서 클러스터를 만들려고 한다. 특히 이 클러스터는  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  구조를 만드는 구성단위의 역할을 한다. 이들 구조에 대한 주사전자현미경(STM) 영상을 계산해 보면 실험과 잘 맞음을 알 수 있다.

## II. 계산방법

VASP코드[23]를 이용하여 표면구조를 계산하였다. 이 계산에서는 원자와 전자간의 상호작용은 ultrasoft pseudopotential[24]을, 전자와 전자간 상호작용은 일반

\* [전자우편] jsm@chonbuk.ac.kr

기울기근사(generalized gradient approximation: GGA)[25]를 사용하였다. 표면은 supercell을 써서 모사하였는데 Si 원자층 여섯 개와 두께 10 Å인 진공층이 포함되어 있다. 맨 아래층의 Si은 수소 원자를 하나씩 결합하여 활성을 없앴다. 계산에 두 종류의 supercell을 사용하였는데 표면에 나란한 방향으로 주기가 각각  $4\sqrt{3} \times 4\sqrt{3}$ 와  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ 이다. 기저로 사용한 평면과의 최대운동에너지는 13 Ry이고 k 공간 적분에는 두 종류의 supercell 모두  $2 \times 2$  그물눈을 사용하였다. 평형원자구조를 얻기 위해서는 가장 아래층 Si과 수소를 제외하고 힘의 크기가 0.02 eV/Å 이하가 되도록 완화시켰다.

### III. 결과 및 고찰

#### 1. 원자구조

먼저 기관인  $\sqrt{3}$ -Ag 표면을 설명하면, Si(111) 위에는 은 원자를 1 ML 흡착하여 가열하면 생성된다. Fig. 1(a)의 열은 색 구로 표시하였듯이 기관의 은 원자들은 Si 위에 삼각형 그물망을 만들고  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  단위 세포(Fig. 1(a)에 마름모로 표시)에 두 개가 들어간다. 그리고 Si 원자는 이 상적인 Si 단면에 독립적으로 삼각형을 만든다. 이 구조는 honeycomb-chained triangle(HCT) 모델로 알려져 있었다[26]. 그러나 온도를 상온 이하로 내리면 은 삼각형 두개는 한 변의 길이가 각각 3.88 Å, 3.00 Å인 크고 작은 것으로 나누어지면서 에너지가 더 낮아진다. 이들을 각각 큰 삼각형(large triangle; LT)과 작은 삼각형(small triangle; ST)라고 부르겠다. 그리고 이 구조를 inequivalent triangle(IET) 모델이라고 부른다[27]. 이 논문에서는 저온에서 관찰되는 구조를 다루고 있기 때문에 IET 모델에 은 원자를 흡착시킨다.

Fig. 1은  $4\sqrt{3} \times 4\sqrt{3}$  supercell에 은 원자를 한 개, 두 개, 세 개, 네 개를 흡착한 경우 평형 원자구조이다. 은의 덮임율은 각각 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 ML에 해당된다. 특이한 것은 은 흡착원자를 기관의 은 원자층보다 2 Å 위에 놓더라도 모두 은 원자층 아래로 잠겨버린다는 것이다. 대체로 0.07 Å 만큼 은 원자층 아래로 내려간다.

위에서 언급했듯이  $\sqrt{3}$ -Ag 기관에는 흡착 위치가 될 수 있는 삼각형에 세 개가 있는데, 이들은 각각 LT, ST,

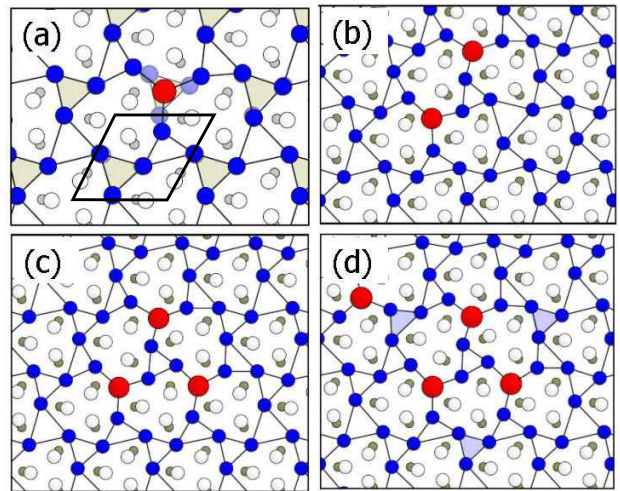


Figure 1. Equilibrium structures on Ag/Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  for (a) a single, (b) two, (c) three, and (d) four Ag adatoms. The white, small grey, small dark, and large dark spheres indicate the Si atoms forming Ag triangles, Si atoms in a deeper layer, substrate Ag atoms, and Ag adatoms. Lightly-shaded spheres in (a) denote the position of the substrate Ag atoms on the pristine IET structure (before Ag adsorption). Lightly shaded regions in (a) and (d) indicate the small triangles. The rhombus in (a) indicate the  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  unit cell.

SiT(silicon triangle)이다. 이들 중 ST에 흡착되는 것이 에너지가 가장 안정된다. 이 곳의 흡착에너지는 ST, LT, SiT가 각각 2.44, 2.24, 1.09 eV이다(흡착에너지는 흡착하지 않은 은 원자와 기관의 에너지와 흡착된 구조의 에너지 차이를 의미한다. 다른 금속이 흡착될 경우 에너지는 [12] 참조).

Fig. 1(a)는 은 원자가 ST 위치에 흡착될 경우의 평형 원자구조이다. 이 구조에서 특이한 것은 표면 아래 잠기는 것 외에 기관의 은 원자들이 상당히 이동한다는 것이다(Fig. 1(a)에서 연하게 표시한 원자와 진하게 표시한 원자 비교). 은 원자가 흡착된 ST는 변의 크기가 4.87 Å으로 커지고 주변에 있는 LT는 2.9 ~ 3.5 Å으로 줄어든다. 이러한 구조 변화는 뒤에서 설명하겠지만 STM 영상을 해석하는데 아주 중요하다. 반면에 LT에 흡착되면 구조 변화는 ST 보다는 훨씬 작은 편이다.

은 adatom이 흡착될 때 기관의 은 원자층에 큰 변형이 일어나는 것은 Si과 Ag의 격자상수가 차이가 나기 때문이다. (111) 방향의 Si의 격자상수는 3.84 Å(실험값)인 반면에 Ag의 격자상수는 2.89 Å(실험값)이다. 즉 Si 세 주기

가 Ag 네 주기와 거의 같다. 따라서 Si(111)에 Ag 원자는 원칙적으로 16/9 ML까지 수용할 수 있는 공간이 있다. 그렇지만 실제로는 1 ML가 포화덮임율이다. IET 모델의 경우, 은 원자 간의 거리는 3.88 Å과 3.00 Å으로 벌크 상태의 2.94 Å(계산값)보다는 훨씬 크다. 따라서 은 adatom이 ST(LT)에 흡착될 경우 주변의 LT(ST)들은 축소되어 은 원자들 간 거리가 가까워져서 에너지가 낮아진다. 은 adatom이 ST에 흡착되는 경우 adatom과 주변의 은 원자들 간 거리는 약 2.8 Å으로 벌크에 비해 약 4%정도 작은 수준이다. 주변의 LT들은 변의 길이가 3.88 Å에서 2.9 ~ 3.5 Å으로 축소되어 벌크에 가까운 상태로 된다. 또한 은 adatom이 LT에 흡착될 때도 adatom 주변의 원자들 간 거리는 ST에 흡착될 때와 거의 같다. 즉, LT 주변 ST의 변의 길이가 3.00 Å에서 2.9 ~ 3.5 Å으로 바뀌기 때문에 거의 변형이 일어나지 않는다. 간단히 요약하면 ST에 흡착된 경우는 주변 기판의 Ag 원자들 간 거리가 축소되어, 다시 말해 결합에너지가 커져서, 에너지가 낮아지는 반면에, LT에 흡착되는 경우는 축소되는 Ag-Ag 결합이 적어서 많은 이득을 보지 못한다. 이러한 이유로 ST에 흡착된 경우가 LT에 흡착되는 것보다 에너지가 낮다.

흡착되는 은 원자의 수를 늘리더라도 대부분 ST 위치에 자리잡는다. 두 개일 때는 은 원자는 나란히 있는 두 ST 위치에 흡착된다(Fig. 1(b)). 세 개일 때는 LT를 가운데 두고 세 ST에 흡착되어 은 원자들이 삼각형을 만든다. ST는 늘어나는 반면에 중앙의 LT는 크게 줄어들어 원래 ST보다도 작아진다. 네 번째 은 원자는 이미 흡착된 은 원자에 의해 확장된 ST들 때문에 ST(Fig. 1(d)에서 연하게 칠한 부분)에 앉으면 압축 응력(stress)을 받게 된다. 따라서 네 번째 원자는 LT에 흡착된다.

은 adatom의 덮임율이 증가함에 따라서 나타나는 구조의 안정성을 조사하기 위하여 클러스터에너지( $E_d$ )를 계산하였다.  $E_d$ 은  $E_d = E_b^n - nE_b^1$ 로 정의하였는데,  $n$ 은 클러스터의 크기(흡착 은 원자의 수)이고  $E_b^n$ 은  $n$ 원자 클러스터의 흡착에너지이다. 이 정의를 쓰면 기판의 효과를 제거할 수 있다.  $n = 1$ 이면  $E_d = 0$ 가 되므로 기준 에너지가 된다. 따라서  $E_d$ 의 의미는 기판 위에서 은 원자들이 따로 있는 것보다 서로 모이게 될 때 이득 보는 에너지의 크기가 된다. 일종의 클러스터의 결합에너지라고 할 수 있다.  $n = 1 \sim 4$  일 경우(각각 Fig. 1(a) ~ (d)에 해당)  $E_d$ 의 계산결과는 Fig. 2에 나타나 있다.  $n$ 이 커짐에 따라  $E_d$ 이 증가하다가

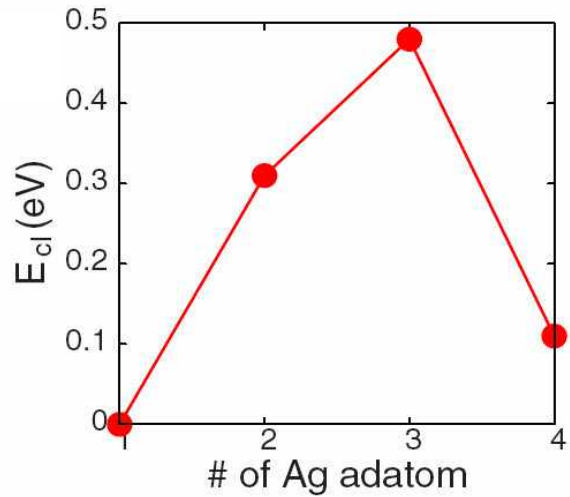


Figure 2. Cluster energy,  $E_d$ , as a function of cluster size.  $E_d$  is calculated as  $E_d = E_b^n - nE_b^1$ , where  $n$  and  $E_b^n$  are the size of the cluster and adsorption energy of the  $n$ -Ag cluster relative to the  $\sqrt{3}$ -Ag substrate.

$n = 3$ 일 때 최대가 되고 그 이후에는 급격히 감소한다는 것이다. 즉,  $n = 3$ 일 때 결합에너지가 가장 커진다는 것을 의미한다. 은 원자들이 별도로 있는 것보다는 세 개가 모여서 클러스터를 만드는 것이 에너지 면에서 유리하다고 할 수 있다. 그리고  $\sqrt{3}$ -Ag 기판에 흡착된 은 원자는 아주 빠르게 움직인다(확산 장벽을 계산해 보면 겨우 0.22 eV 밖에 되지 않는다[28]). 따라서 아주 쉽게 은 클러스터를 형성할 것임을 예상할 수 있다.

은의 덮임율이 0.14 ML에 이르게 되면  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  주기를 갖는 새로운 구조가 나타난다. 현재 이 구조에 대하여 여러 가지 모델이 제안되어 있다[11,15-17]. 단위 세포 안에 원자의 개수가 3, 4, 5로 다양하고 흡착 위치도 ST, LT, SiT로 통일이 되어있지 않아서 어떤 구조가 가장 실험과 잘 일치하는지 알 수가 없는 형편이다. 최근의 연구에서는 STM 결과를 바탕으로 Fig. 1(c)와 같은 삼원자 클러스터가  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  구조의 구성 단위라는 제안이 있었다[11]. 저자들이 제안한 모델은 SiT를 중심으로 하고 그 주위 세 개의 LT에 은 원자가 흡착된다는 것이다. 우리는 그 대신에 에너지가 가장 낮은 Fig. 1(c)를 구성 단위로 하여 구조를 조사한 결과 이 구조의 에너지가 가장 낮음을 알 수 있었다(Fig. 3). 단위 세포 안에 은 원자가 세 개 들어 있고 이들은 LT를 중심으로 모두 ST 위치에 자리 잡는다. 예상대로 은 원자가 흡착된 ST는 상당히 확장되는 반면(면적은

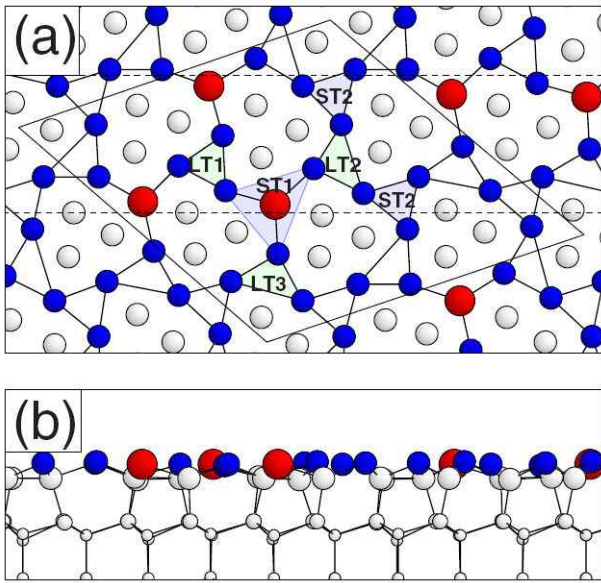


Figure 3. Equilibrium structure of the  $\sqrt{2}1$ -Ag: (a) Top view and (b) side view. The rhombus in (a) indicates the  $\sqrt{2}1 \times \sqrt{2}1$  unit cell. For the symbols representing atoms, see Fig. 1.

160 % 증가)에 흡착원자들의 중심에 있는 LT는 상당히 축소되었다(면적은 45 % 감소). 이 구조는 이전에 제안된 다른 모델들에 비해 에너지가 Ag 원자 당 0.33 ~ 1.31 eV 에너지가 높았다. 단 Liu 등의 모델[11]만이 우리 모델과 에너지가 가깝지만 그래도 단위 세포 당 0.1 eV 정도 에너지가 높았다.

## 2. STM 영상

다음은 앞에서 구한 구조들의 주사터널링현미경(STM) 영상을 계산해 보았다. Fig. 4(a), (b)는 흡착원자가 하나인 경우(Fig. 1(a))의 찬 상태와 비어 있는 상태에 대한 영상이다. 찬 상태의 영상을 보면 은 흡착원자는 Si 삼각형과 함께 어둡게 보이고 이들은 삼각형 별 같이 보인다. 반면에 비어 있는 상태의 영상에서는 흡착원자가 밝게 보이고 그 주위의 LT, 그리고 LT 주위의 ST들이 모두 밝게 보인다(원래  $\sqrt{3}$ -Ag에서 LT는 어둡게 보이고 ST는 밝게 보인다). 여기서 LT가 밝게 보인 이유는 은 원자의 흡착으로 인하여 축소되었기 때문이다. 이런 STM 영상을 ‘star’ 모양이라고 부른다[10]. 흡착원자가 찬 영상에서 어둡게 보이고 비어 있는 영상에서 밝게 보인다는 것은 흡착원자에서 기관으로 전하가 이동하였음을 의미한다. 따라서 은과 같은 흡착원

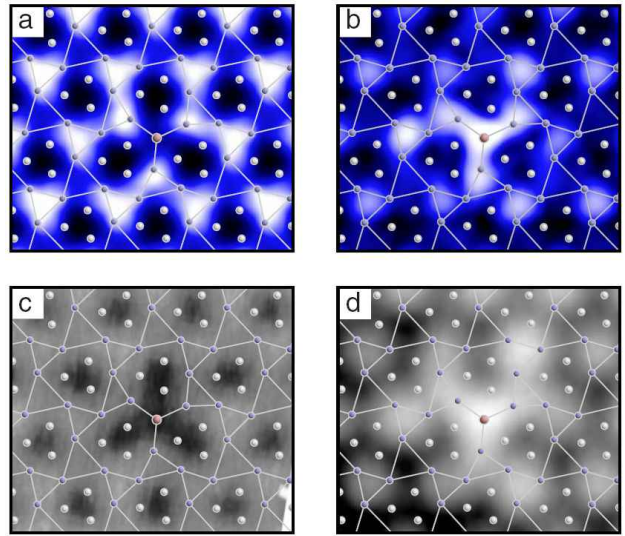


Figure 4. (a), (b) Simulated and (c), (d) experimental[10] STM images for a Ag adatom on  $\sqrt{3}$ -Ag of Fig. 1(a). The biases are -1.5, +1.0, -1.0, and +1.3 V for (a), (b), (c), (d), respectively.

자는  $\sqrt{3}$ -Ag에서 도핑 물질 역할을 하고 이 도핑에 의해서  $\sqrt{3}$ -Ag의 금속성 밴드가 채워져서 2차원 전자기체가 형성되는 것이다. 시뮬레이션 영상들을 실험[10]과 비교해 보면 밝은 점의 크기만 제외하고는 아주 잘 일치함을 알 수 있다.

다음은 삼원자 클러스터에 대한 STM 영상이다(Fig. 5).

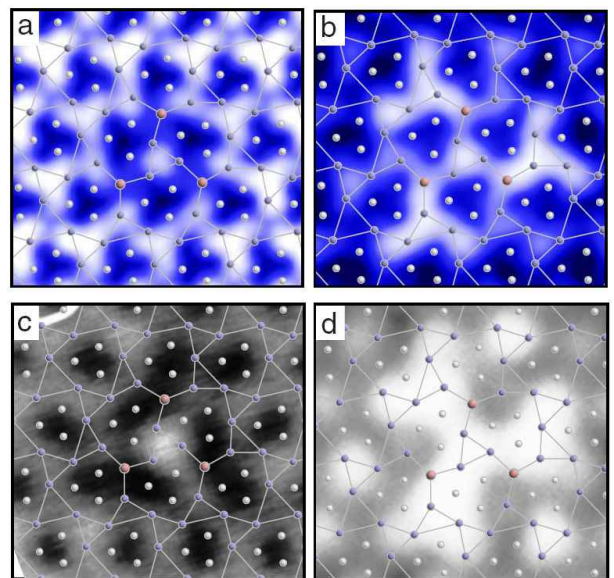


Figure 5. (a), (b) Simulated and (c), (d) experimental[10] STM images for a three-Ag cluster on  $\sqrt{3}$ -Ag of Fig. 1(c). The biases are -1.0, +0.5, -1.0, and +1.0 V for (a), (b), (c), (d), respectively.

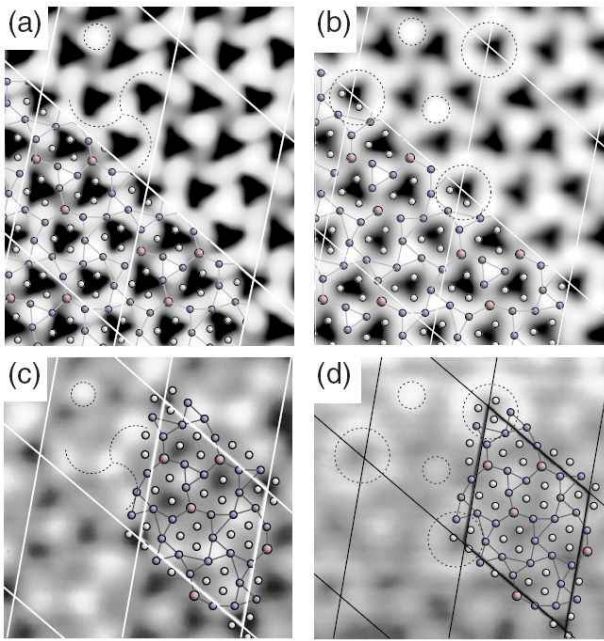


Figure 6. (a), (b) Simulated and (c), (d) experimental[7] STM images for the  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ -Ag phase of Fig. 3. The biases are  $-1.0$  V for filled-states [(a) and (c)] and  $+1.0$  V for the empty-states [(b) and (d)].

여기서도 찬 상태에서는 은 흡착원자가 어둡게 보인다. 비어 있는 상태에서 ST와 축소된 LT, 은 흡착 원자는 밝게 보인다. 이들의 모양을 star와 구별하여 ‘propeller’라고 부른다[10]. 이 구조에 대한 시뮬레이션 영상 역시 실험과 잘 일치한다. STM 실험에서 보면 star와 propeller는 모양과 크기에서 언뜻 구별이 잘 되지 않는다. 그래서 최근의 논문에서는 star를 propeller로 잘못 표시하기도 하였다 [9]. Star와 propeller를 구별하는 큰 기준은 중심이 LT에 있는가 아니면 ST에 있는가이다. 중심이 ST에 있으면 (은 흡착 원자가 있는) star이고 LT에 있으면 (은 흡착원자에 둘러싸인) propeller이다.

Fig. 6은  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ -Ag의 STM 영상이다. 찬 상태의 실험 영상(Fig. 6(c))[7]을 보면 단위 세포 안에 밝게 보이는 곳이 다섯 군데 있다. 이 중 하나는 독립적으로 있고 다른 네 개는 모여서 프로펠러와 같은 모양을 만든다. 반면에 비어 있는 상태의 영상에는 모서리에 고리 모양의 특징과 내부에 밝은 점 두 개가 보인다. 찬 상태의 시뮬레이션 영상을 살펴보면, 독립적으로 보이는 것은 Ag 흡착원자들에 둘러싸인 축소된 LT(Fig. 3에서 LT1)이고 나머지 밝은 점들은 ST2들에 의한 것이다. 비어 있는 상태의 영상에 보이는 고리는 ST와 축소된 LT에 의한 것이다. 단위 세포 내부의

밝은 두 점은 LT1과 ST2에 의한 것이다(Fig. 3 참조). 즉, 단위 세포에 은 원자 세 개가 ST에 들어가 있는 Fig. 3의 구조는 STM 영상도 잘 재현해 내고 있다. 그러나 에너지가 가장 비슷한 Liu 모델의 STM 영상을 계산해 보면 실험과 큰 차이가 있음을 알 수 있다. 따라서  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ -Ag의 구조로는 Fig. 3의 구조가 가장 유력하다고 결론을 지을 수 있다( $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ -Ag의 전자구조는 [21]을 참조).

#### IV. 결 론

제일원리계산 방법을 이용하여  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 표면에 은 원자가 추가로 흡착된 표면의 원자구조와 에너지를 조사하였다. 은 원자는 기관 은 원자층의 ST 위치에서 가장 안정되었고 은 원자층보다 약간 아래에 자리 잡았다. 이로 인해 기관의 은 원자들은 크게 변형이 되었는데, ST는 확장되고 LT는 축소되었다. 흡착된 은의 수가 늘어감에 따라 은 원자들은 클러스터를 만들려고 하였다. 클러스터 에너지를 계산에 따르면 원자 세 개가 모일 때 가장 안정되었다. 이 삼원자 클러스터는  $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ -Ag 구조의 구성 단위가 되었다. 각 구조들에 대하여 STM 영상을 시뮬레이션 해서, 실험에서 보이는 ‘star’는 은 원자 하나가 흡착된 것이고, ‘propeller’는 은 원자 세 개가 모여서 만든 것임을 확인할 수 있었다. 그리고 STM 영상에서 은 원자는 찬 상태에서 어둡게 보이고 비어 있는 상태에서는 밝게 보였다. 이는 은 원자가 기관으로 전하를 제공함을 의미한다.

#### 참고문헌

- [1] S. Hasegawa, X. Tong, S. Takeda, N. Sato, and T. Nagao, *Prog. Surf. Sci.* **60**, 89 (1999).
- [2] E. Fradkin, S. A. Kivelson, E. Nanousakis, and K. Nho, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1982 (2000).
- [3] K. Hirakawa and H. Sakaki, *Phys. Rev. B* **33**, 8291 (1986).
- [4] J. N. Crain, K. N. Altmann, C. Bromberger, and F. J. Himpsel, *Phys. Rev. B* **66**, 205302 (2002).
- [5] T. Hirahara, I. Matsuda, M. Ueno, and S. Hasegawa, *Surf. Sci.* **563**, 191 (2004).

- [6] C. Liu, I. Matsuda, R. Hobara, and S. Hasegawa, Phys. Rev. Lett. **96**, 036803 (2006).
- [7] X. Tong, S. Ohuchi, N. Sato, T. Tanikawa, T. Nagao, I. Matsuda, Y. Aoyagi, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **64**, 205316 (2001).
- [8] I. Matsuda, T. Hirahara, M. Konishi, C. Liu, H. Morikawa, M. D'angelo, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **71**, 235315 (2005).
- [9] M. Ono, Y. Nishigata, T. Nishio, T. Eguchi, Y. Hasegawa, Phys. Rev. Lett. **96**, 016801 (2006).
- [10] N. Sato, T. Nagao, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **60**, 16083 (1999).
- [11] C. Liu, I. Matsuda, M. D'angelo, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **74**, 235420 (2006).
- [12] H. Jeong, H. W. Yeom, and S. Jeong, Phys. Rev. B **76**, 085423 (2007).
- [13] Z. H. Zhang, S. Hasegawa, and S. Ino, Phys. Rev. B **52**, 10760 (1995).
- [14] M. D'angelo, M. Konishi, I. Matsuda, C. Liu, S. Hasegawa, T. Okuda, and T. Kinoshita, Surf. Sci. **590**, 162 (2005).
- [15] Y. Fukaya, A. Kawasuso, and A. Ichimiya, Surf. Sci. **600**, 3141 (2006).
- [16] X. Tong, Y. Sugiura, T. Nagao, M. Takami, S. Takeda, S. Ino, and S. Hasegawa, Surf. Sci. **408**, 146 (1998).
- [17] J. Nogami, K. J. Wan, and X. F. Lin, Surf. Sci. **306**, 81 (1994).
- [18] X. Tong, C. S. Jiang, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **57**, 9015 (1998).
- [19] H. Tajiri, K. Sumitani, W. Yashiro, S. Nakatani, T. Takahashi, K. Akimoto, H. Sugiyama, X. Zhang, and H. Kawata, Surf. Sci. **493**, 214 (2001).
- [20] H. M. Zhang, K. Sakamoto, and R. I. G. Uhrberg, Phys. Rev. B **64**, 245421 (2001).
- [21] H. Jeong, H. W. Yeom, and S. Jeong, Phys. Rev. B **77**, 235425 (2008).
- [22] X. Tong, S. Hasegawa, and S. Ino, Phys. Rev. B **55**, 1310 (1997).
- [23] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, R558 (1993); G. Kresse and J. Furthmuller, *ibid.* **54**, 11169 (1996).
- [24] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **41**, R7892 (1990).
- [25] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [26] Y. G. Ding, C. T. Chan, and K. M. Ho, Phys. Rev. Lett. **67**, 1454 (1993).
- [27] H. Aizawa, M. Tsukada, N. Sato, and S. Hasegawa, Surf. Sci. **429**, L509 (1999).
- [28] H. Jeong and S. Jeong, unpublished results.

## Structural Evolution on Ag/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ with Adatom Coverage

Hojin Jeong<sup>a</sup> and Sukmin Jeong<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Institute of Physics and Applied Physics, Yonsei University, Seoul 120-746*

<sup>b</sup>*Department of Physics, Chonbuk National University, Jeonju 561-756*

(Received August 15, 2008, Revised September 19, 2008, Accepted September 23, 2008)

Using a first-principles total-energy method, we investigate structural and energy changes on Ag/Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  ( $\sqrt{3}$ -Ag hereafter) as the number of the additional Ag adatoms increases. The Ag coverage varies from 0.02 to 0.14 ML. Most Ag adatoms occupy the ST site, which is the center of small triangles of the substrate Ag layer that is composed of small and large triangles. One of the interesting adsorption features is that the adatoms immerse below the substrate layer. The total energy calculations show that the clusters become the most stable when the number of Ag atoms is three. This three-Ag cluster becomes the building block of the  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  phase that shows a large surface conductivity. The simulated STM images show that the adatoms look dark in filled-state images while bright in empty-state images. This suggests that the adatoms donate their charge to the substrate. The simulated STM images agree well with the experimental images.

Keywords : Ag/Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , Two-dimensional electron gas (2DEG), Adatom, First-principles calculation, Scanning-tunneling microscopy

\* [E-mail] [jsm@chonbuk.ac.kr](mailto:jsm@chonbuk.ac.kr)