

硅(111)面 2×1 重构表面和硅(100) 面的电子态密度的模型计算

傅 卓 武

(复旦大学 物理系)

1980年11月12日收到, 1981年8月17日修改定稿

提 要

本文采用一种简单的模型, 应用传递矩阵的格林函数方法, 计算了 Si(111) 2×1 重构表面以及 Si(100) 面的电子态密度。计算结果表明, 在合理地作出一些假定后, 本文和其它比较繁复的计算方法所得到的结果, 在定性上是符合的。

一、引言

Si(111) 面和 Si(100) 面的研究是一个相当活跃的课题, 由于它们在半导体器件方面的重要地位, 近年来, 在这方面, 进行了大量的研究。

实验结果表明, 在一定的条件下, Si(111) 面会出现所谓“重构”(reconstruction) 现象, 比较稳定的 Si(111) 面的重构有 7×7 和 2×1 等等。同样, Si(100) 面也会发生重构, 本文只拟对 Si(111) 面的 2×1 重构表面以及清洁的理想 Si(100) 面(即无吸附也不发生重构的表面)进行研究。

关于 Si(111) 面 2×1 重构表面的原子排列, 目前有两种不同的见解^[1,2], 其中以 Taloni 和 Haneman 提出的 2×1 重构表面的原子排列^[1]较为广泛地被接受。

Haneman 等提出的模型如图 1 所示, 表面层的原子分别向上或向下移动, 将一层原子分成两层, 从而在低能原子衍射(LEED) 的花样上, 呈现出 2×1 的结构, 形成所谓“表面重构”现象(Surface reconstruction)。此外, 表面层以下几层的原子排列也有变化。

关于原子位移的方向和数值, 有各种看法^[3-7], 归纳起来, 大致如表 1 所示(仅计入表面层)。

不同的作者分别利用各自的模型, 对 Si(111) 面 2×1 重构表面的电子态以及能带结构作了计算。

Si(100) 面是硅单晶的一个重要的解理面, 对 Si(100) 面的研究正在进行中, 本文将限于计算理想而清洁的 Si(100) 面的能带和电子态。关于 Si(100) 面的原子排列可见图 2。这个表面具有两个悬挂键, 理想的清洁的 Si(100) 面的计算已有不少作者用不同的方法实现过^[8-10], 至于 Si(100) 面的弛豫和重构将不在本文中讨论, 可参见文献[11]。

另一方面, 格林函数方法在表面能态计算中得到了广泛的应用。近年, Falicov 和

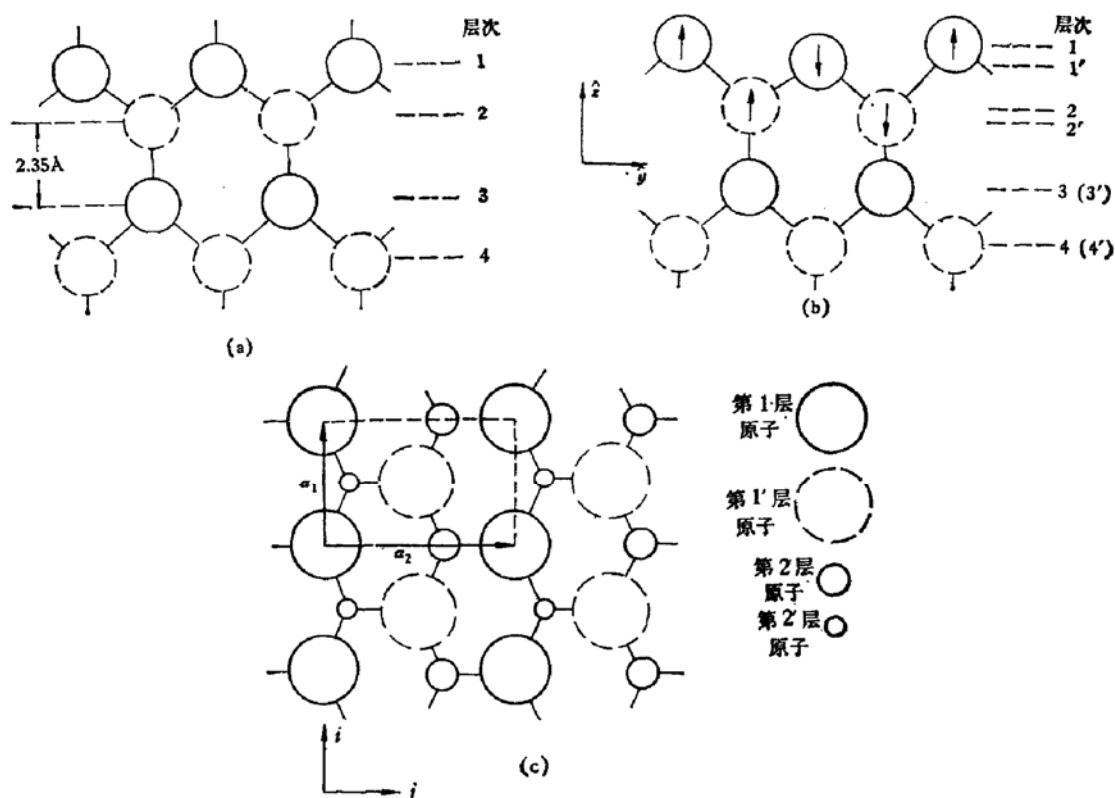


图 1 Si(111) 面 2×1 重构表面原子排列图
 (a) 未重构成表面(侧视) (b) 重构表面(侧视)
 (c) 重构表面(顶视)图中已标出元胞和基矢

表 1

单位 Å

| 文 献 | [3] | [4] | [5] | [6] | [7] |
|---------------|-------|-------|-------|--------|-------|
| ΔZ_1 | 0.18 | 0.35 | -0.06 | -0.095 | 0.31 |
| $\Delta Z'_1$ | -0.11 | -0.29 | -0.54 | -0.60 | -0.44 |
| ΔY_1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.06 |
| $\Delta Y'_1$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.0 |

Yndurain 发展了一种称之为“传递矩阵的格林函数方法”(Transfer-Matrix Green Function;

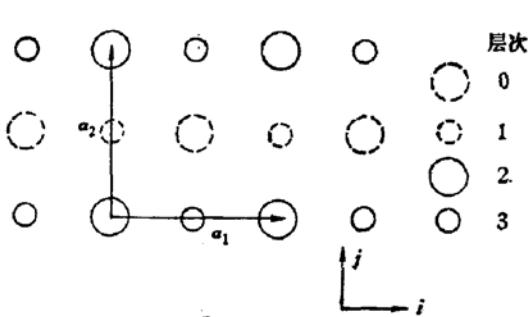


图 2 Si(100)面原子排列图
 图中已标明元胞和基矢

以下简称为 TMG), 由于此法的简明和清楚的物理图象而得到了重视, 应用这种方法, 在 Si(111) 面^[12] 和 GaAs(111) 面^[13] 等表面问题中, 只要作一些很简单的假定, 往往可以得出许多较为本质的结论, 而且可以定性地说明其它比较详尽但繁复的计算结果.

本文采用 TMG 方法, 对 Si(111) 2×1 重构表面以及 Si(100) 面的电子态密度, 进行了计算. 在计算中, 应用了由 Haneman 等提出的 Si(111) 2×1 重构模型, 而且, 在计算中, 只计及 s 波和最近邻近似, 在合理地作

出一些假定后, 可以得出在定性上与已知的其它结果符合的结果。本文的结果, 原则上, 可以推广到更细致的计算中去, 例如, 考虑 sp^3 杂化轨道, 以及计入次最近邻作用等等。

下文就 Si(111) 2×1 重构表面的电子态, 进行详细的推导。Si(100) 面的计算比较简单, 仅写出主要步骤。最后, 对参数的选取以及参数对计算结果的影响, 进行了一些讨论。

二、计算方法

1. Si(111) 面 2×1 重构表面

Si(111) 面 2×1 重构表面的元胞已在图 1(c) 中画出, 元胞的基矢是:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= d(1/\sqrt{2}, 0, 0) \\ \mathbf{a}_2 &= d(0, 3/\sqrt{6}, 0)\end{aligned}$$

其中 d 是晶格常数。

相应的布里渊区如图 3 示, 由于 Si(111) 面 2×1 重构表面的元胞比未重构表面的元胞大一倍, 故布里渊区也小二分之一。

布里渊区的倒格子基矢是:

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi/d(\sqrt{2}, 0, 0) \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi/d(0, \sqrt{6}/3, 0).\end{aligned}$$

我们对每一个原子取一个 s 波轨道, 可写成:

$$|n, \mathbf{r}_i\rangle$$

其中 n 是层次编号, \mathbf{r}_i 是该层中原子 i 的坐标。

我们把每一层的波函数写成该层的原子 s 波函数的布洛赫和的形式:

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) |n, \mathbf{r}_i\rangle$$

为计人同层和相邻层之间的最近邻相互作用, 我们要引入以下结构因子:

$$s(\mathbf{k}) = s^1(\mathbf{k}) + s^2(\mathbf{k})$$

其中,

$$s^1(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k}\sigma)$$

$$s^2(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}_1) + \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}_2)$$

而

$$\sigma = d(0, -1/\sqrt{6}, 0)$$

$$\mathbf{p}_1 = d/2(-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{6}, 0)$$

$$\mathbf{p}_2 = d/2(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{6}, 0)$$

如图 4 所示。

由于表面原子弛豫移动而引起的结构因子的改变用 $L(\mathbf{k}), M(\mathbf{k})$ 来描述:

$$L(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}^L)$$

$$M(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}^M)$$

式中, $\mathbf{r}^L, \mathbf{r}^M$ 分别是表面层原子向上、向下移动后的原子相对于原来位置的位移。

由于表面问题只具有二维周期性, 所以相应的波矢 \mathbf{k} 是二维的, 亦即, 沿表面垂直方

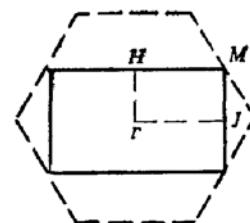


图 3 Si(111) 2×1 重构表面的布里渊区
虚线为未重构的情况

向的结构因子恒为 1.

在本文中采用 Weaire-Thorpe 型的紧束缚的哈密顿量^[15]:

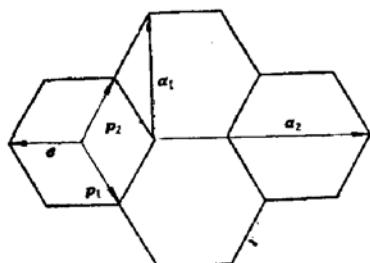


图 4 σ, p_1, p_2 是最近邻原子在 (111) 面上的投影

式中求和遍及所有计及相互作用的原子, $|i\rangle$ ($|j\rangle$) 表示所考虑原子的轨道波函数, 本文中只考虑 s 波。在选取适当的能量零点时, 上式中常可令 $U = 0$.

V_{ij} 是 i 原子和 j 原子间的相互作用, 在只计及最近邻作用时, V_{ij} 为:

$$V_{ij} = \begin{cases} -V & \text{最近邻原子间} \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$$

我们将从表面向体内的原子的层次计为: (见图 1(b))

1, 1', 2, 2', 3, 3', 4, 4'...n, n'...

在表面层, 原子由于弛豫和重构, 导致相互作用 V_{ij} 将发生变化, 我们用下列方式表明这种变化:

第一层原子分成 1, 1' 层后, 自身能量变化为:

$$\langle 1 | H | 1 \rangle = -U_1$$

$$\langle 1' | H | 1' \rangle = -U_{1'}$$

最近邻相互作用为:

$$\langle 1 | H | 2 \rangle = -\rho_1 V$$

$$\langle 1 | H | 2' \rangle = -\rho_2 V$$

$$\langle 1' | H | 2 \rangle = -\rho_3 V$$

$$\langle 1' | H | 2' \rangle = -\rho_4 V$$

其中, $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4, U_1, U_{1'}$ 均为待定的参数, 当然, 它们是实数.

从方程

$$E \hat{G} = \hat{I} + \hat{H} \hat{G}$$

出发, 以每一层原子波函数 $|n, k\rangle$ 为表象, 可写出格林函数的矩阵元:

$$E G_{nn'} = \delta_{nn'} + \sum_l H_{nl} G_{ln'} \quad (2)$$

其中:

$$G_{nn'} = \langle n, k | G | n', k \rangle$$

$$H_{nl} = \langle n, k | H | l, k \rangle$$

$$\delta_{nn'} = 1 \quad \text{若 } n = n'$$

$$\delta_{nn'} = 0 \quad \text{若 } n \neq n'$$

按照格林函数理论, 第 n 层的能量本征值就是 $G_{nn}(\mathbf{k})$ 的奇点, 而第 n 层的电子态密度 $D_n(E)$ 可写成:

$$D_n(E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{k}} G_{nn}(\mathbf{k}) \quad (3)$$

对整个布里渊区的 \mathbf{k} 求和。

我们以下只对表面层的情况感兴趣, 所以, 我们只须求出 G_{11} 和 $G_{1'1'}$.

我们若记

$$G_{m1} = G_m (m = 1, 1', 2, 2', 3, 3' \dots).$$

计入最近邻近似, 我们可写出下列方程:

$$(E + U_1)G_1 = 1 - \rho_1 V s^1(\mathbf{k}) L^*(\mathbf{k}) G_2 - \rho_2 V s^2(\mathbf{k}) L^*(\mathbf{k}) G_{2'} \quad (4)$$

$$(E + U_{1'})G_{1'} = -\rho_3 V s^2(\mathbf{k}) M^*(\mathbf{k}) G_2 - \rho_4 V s^1(\mathbf{k}) M^*(\mathbf{k}) G_{2'} \quad (5)$$

$$EG_2 = -\rho_1 V s^{1*}(\mathbf{k}) L(\mathbf{k}) G_1 - \rho_3 V s^{2*}(\mathbf{k}) M(\mathbf{k}) G_{1'} - VG_3 \quad (6)$$

$$EG_{2'} = -\rho_2 V s^{2*}(\mathbf{k}) L(\mathbf{k}) G_1 - \rho_4 V s^{1*}(\mathbf{k}) M(\mathbf{k}) G_{1'} - VG_3 \quad (7)$$

无穷递推方程是: ($n \geq 2$)

$$EG_{2n-1} = -VG_{2n-2} - V s^1(\mathbf{k}) G_{2n} - V s^2(\mathbf{k}) G_{(2n)}' \quad (8)$$

$$EG_{(2n-1)} = -VG_{(2n-2)}' - V s'(\mathbf{k}) G_{(2n)} - V s^2(\mathbf{k}) G_{2n} \quad (9)$$

$$EG_{2n} = -VG_{2n+1} - V s^{1*}(\mathbf{k}) G_{2n-1} - V s^{2*}(\mathbf{k}) G_{(2n-1)}' \quad (10)$$

$$EG_{(2n)}' = -VG_{(2n+1)}' - V s^{1*}(\mathbf{k}) G_{(2n-1)} - V s^{2*}(\mathbf{k}) G_{2n-1} \quad (11)$$

以上(4)–(11)式给出了从表面到体内的全部物理知识, 我们对之严格求解.

定义 $F_n = G_n + G_n'$

以及传递函数 T_1 和 T_2 (假如它们不随 n 而变):

$$\begin{aligned} T_1 &= F_{2n-1}/F_{2n-2} & n \geq 2 \\ T_2 &= F_{2n}/F_{2n-1} \end{aligned} \quad (12)$$

代入可得到:

$$\left. \begin{aligned} ET_1 &= -V - VT_1 T_2 [s^1(\mathbf{k}) + s^2(\mathbf{k})] \\ ET_2 &= -VT_1 T_2 - V[s^{1*}(\mathbf{k}) + s^{2*}(\mathbf{k})] \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

上式与文献[12]的(3, 6)式完全相同, 只须视

$$s(\mathbf{k}) \rightarrow s^1(\mathbf{k}) + s^2(\mathbf{k}) \text{ 即可.}$$

解方程可得 T_1 和 T_2 , 它们都是 E 和 \mathbf{k} 的函数.

定义:

$$\left. \begin{aligned} H_n &= G_n - G_n' \text{ 以及} \\ T_3 &= H_{2n-1}/H_{2n-2} \\ T_4 &= H_{2n}/H_{2n-1} \end{aligned} \right\} \quad n \geq 2 \quad (14)$$

整理后可得到:

$$\left. \begin{aligned} ET_3 &= -VT_3 T_4 [s^1(\mathbf{k}) - s^2(\mathbf{k})] - V \\ ET_4 &= -VT_3 T_4 - V[s^{1*}(\mathbf{k}) - s^{2*}(\mathbf{k})] \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

(15) 和 (13) 式类似, 所以 T_3 , T_4 也可以得出.

注意到定义(12)式和(14)式, 我们可写出 G_3 和 $G_{3'}$:

$$G_3 = \frac{1}{2} [(T_1 + T_3) G_2 + (T_1 - T_3) G_{2'}] \quad (16)$$

$$G_{3'} = \frac{1}{2} [(T_1 + T_3) G_{2'} + (T_1 - T_3) G_2] \quad (17)$$

以(16)和(17)式代入(6)和(7)式, 可得到关于 G_2 和 $G_{2'}$ 的一组线性联立方程

式,然后将 G_2 和 $G_{2'}$ 解出,它们将是 G_1 和 $G_{1'}$ 的线性函数,再代入(4)和(5)式,将得到关于 G_1 和 $G_{1'}$ 的一组线性联立方程,最后,我们可以求出 G_1 ,从而得到第1层的格林函数矩阵元的解析式,进而可获得有关表面层的物理知识.

以下为简单起见,假定:

$$U_1 = U_{1'} = 0$$

以后,我们再讨论 U_1 和 $U_{1'}$ 不等于零的情况.

进而,为简单起见,我们假定,在不计人第2,第2'层原子的位移情况下,有:

$$\rho_1 = \rho_2, \quad \rho_3 = \rho_4$$

这样,我们经过一些直接的运算,可求得:

$$\begin{aligned} G_{11}(E, \mathbf{k}) &= G_1 \\ &= \frac{\gamma^2 E + \rho_3^2 J(E, \mathbf{k})}{\gamma^2 E^2 + (\rho_1^2 + \rho_3^2) J(E, \mathbf{k}) E - \rho_1^2 \rho_3^2 (C_2^2 - C_1^2)} \end{aligned} \quad (18)$$

其中 $\gamma^2 = A^2 - B^2$, $A = E + (T_1 + T_3)/2$,

$$B = (T_1 - T_3)/2, \quad C_1 = |s^1(\mathbf{k})|^2 + |s^2(\mathbf{k})|^2,$$

$$C_2 = s^{1*}(\mathbf{k}) s^2(\mathbf{k}) + s^1(\mathbf{k}) s^{2*}(\mathbf{k}), \quad J(E, \mathbf{k}) = BC_2 - AC_1.$$

以上同时已命 $V = 1$, 即能量以 V 为单位.

值得注意的是在(18)式中,并不出现因重构所引起的表面原子弛豫的附加结构因子 $L(\mathbf{k})$, $M(\mathbf{k})$, 这意味着,在我们所作的近似下,这种原子位移带来的影响,已经由 ρ_1 和 ρ 加以描述,对布里渊区的每一点,这种影响都是相同的.

此外,不难看出,(18)式的分子是能量 E 的奇函数,而分母则是 E 的偶函数,按照格林函数的理论,我们可以立刻得出, $E(\mathbf{k})$ 将是关于 $E = 0$ 对称的,进而 $D_1(E)$ 也将是关于 $E = 0$ 对称的,所以,我们只需求出 $E > 0$ 的情况就够了.

以上这种对称性,当然是我们只计及 s 波一个轨道的结果,这和文献[12]相合.当我们进一步引入 sp^3 轨道波函数时,这种对称性将不复存在.

我们从方程(4)一(7)可以看出,在考虑理想表面时,上述方程自动回到文献[12]的结果,只是我们要用 F_n 来代替 G_n 和 $G_{n'}$.

根据格林函数的理论,我们只须找出(18)式的奇点,即找出方程

$$\gamma^2 E^2 + (\rho_1^2 + \rho_3^2) J(\mathbf{k}, E) E - \rho_1^2 \rho_3^2 (C_2^2 - C_1^2) = 0$$

的根,此根就是我们关心的能带结构 $E = E(\mathbf{k})$,而电子态密度可直接由(3)式求出.

完全类似的,可以求得 $G_{11'}(E, \mathbf{k})$.事实上,只须在(18)式中作 $\rho_1 \leftrightarrow \rho_3$ 的代换即可.不难看出, G_1 , $G_{1'}$ 和 $G_{11'}$ 具有相同的奇点,即第一层和第1'层在我们这种近似下,具有相同的能带结构.至于电子态密度,由于 $\rho_1 \neq \rho_3$,所以,结果不会相同,而且可以看出,由于 $\rho_1 \neq \rho_3$,电子态密度曲线的最大值将发生在不同的能量上.

将第1层和第1'层的电子态密度相加,就可以得到表面一层的定域电子态密度(LDOS).

上述工作可以类似地进行下去,求得第2(2'),第3(3')层至体内的每一层的LDOS,这是TMG法的一个特点.数值计算,将在第三部份论述.

2. Si(100) 面

关于 Si(100) 面的计算, 由于在方法上类似上述的对 Si(100) 面 2×1 重构表面的处理, 所以下只作简单的叙述:

Si(100) 面的元胞已在图 2 中标出, 其基矢是

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \sqrt{2}/2 d (1, 0, 0) \\ \mathbf{a}_2 &= \sqrt{2}/2 d (0, 1, 0)\end{aligned}$$

相应的布里渊区如图 5 所示。

倒格子基矢是:

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\sqrt{2}\pi/d (1, 0, 0), \\ \mathbf{b}_2 &= 2\sqrt{2}\pi/d (0, 1, 0).\end{aligned}$$

我们定义结构因子

$$\begin{aligned}s_1(\mathbf{k}) &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{t}_1) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{t}_1) \\ s_2(\mathbf{k}) &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{t}_2) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{t}_2)\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}\mathbf{t}_1 &= \sqrt{2}/4 d (1, 0, 0) \\ \mathbf{t}_2 &= \sqrt{2}/4 d (0, 1, 0)\end{aligned}$$

如图 6 所示。

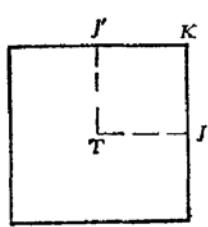


图 5 Si(100) 面的布里渊区

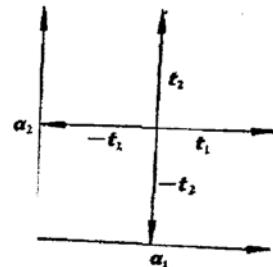


图 6 $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, -\mathbf{t}_1, -\mathbf{t}_2$ 是最近邻原子的坐标在 (100) 面上的投影

在 Si(100) 面的计算中, 我们也只考虑原子的 s 轨道, 并且只计人最近邻相互作用, 当哈密顿量仍取(1)式时, 我们有:

$$\langle i | H | j \rangle = \begin{cases} -U_0 & i = j \\ -V & i, j \text{ 是最近邻原子} \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

当 i 或 j 之一为表面层(0 层)原子时, 相应的作如下变动:

$$\begin{aligned}-U_0 &\rightarrow -U_t - U \\ V &\rightarrow \rho V\end{aligned}$$

类似上述对 Si(111) 面的处理, 按(2)式展开得:

$$\begin{aligned}EG_0 &= 1 - UG_0 - \rho V s_1(\mathbf{k}) G_1 \\ EG_1 &= -\rho V s_1(\mathbf{k}) G_0 - V s_2(\mathbf{k}) G_2 \\ EG_2 &= -V s_2(\mathbf{k}) G_1 - V s_1(\mathbf{k}) G_3\end{aligned}$$

$$EG_3 = -Vs_1(\mathbf{k})G_2 - Vs_2(\mathbf{k})G_4$$

和递推关系:

$$\begin{aligned} EG_{2n} &= -Vs_2(\mathbf{k})G_{2n-1} - Vs_1(\mathbf{k})G_{2n+1} \\ EG_{2n+1} &= -Vs_1(\mathbf{k})G_{2n} - Vs_2(\mathbf{k})G_{2n+2} \end{aligned} \quad n \geq 1$$

其中 $G_n = \langle n | G | 0 \rangle$, ($n \geq 0$).

在定义传递函数 T_1 和 T_2 ,

$$\begin{aligned} T_1 &= G_{2n+1}/G_{2n} & n \geq 1 \\ T_2 &= G_{2n}/G_{2n-1} \end{aligned}$$

之后, 我们就可解出 T_1 , T_2 . 进而可以求出

$$G_0 = G_{00} = [E + U + \rho^2 Vs_1(\mathbf{k})T_1]^{-1} \quad (19)$$

从(19)式可得到能量

$$E(\mathbf{k}) = \pm \rho V [|s_1(\mathbf{k})|^2 + |s_2(\mathbf{k})|^2 / (\rho^2 - 1)]^{1/2} - U \quad (20)$$

以及态密度.

由于只考虑 s 轨道和最近邻近似, $E(\mathbf{k})$ 关于 $E = 0$ 是对称的, 在计算中, 只须考虑 $E > 0$ 的一支.

三、计算结果

作为例子, 我们来计算一下数值结果.

1. Si(111)面 2×1 重构表面

文献[16]提出了一个经验公式:

$$H_{ij} = H_{ij}^0 (d_{ij}^0/d_{ij})^2 \quad (21)$$

即矩阵元与原子间距离有平方反比的关系, 本文在计算中, 采用上式作为依据.

依照文献[4]提出的原子间变化的数据和(21)式, 我们可以定出:

$$\rho_1 = 0.97\rho$$

$$\rho_3 = 1.11\rho$$

式中 ρ 是未重构表面的最近邻相互作用的作用参数, 仿照文献[12], 我们也认为:

$$\rho = \sqrt{3}.$$

至于不为零的 U_1 和 $U_{1'}$ 的问题, 我们留到讨论中加以分析, 以下, 我们只列出 $U_1 = U_{1'} = 0$ 的情况.

图7画出了相应于 $U_1 = U_{1'} = 0$ 的态密度, 这是在 $\frac{1}{4}$ 的 Si(111) 面 2×1 重构表面的布里渊区中, 计算了 81 个不等价的 \mathbf{k} 点的结果.

从图7可以看出, 在第1层和第1'层的态密度曲线中, 尖峰出现在相近的不同能量上. 事实上, 由于发生了表面重构, 表面存在着两种不同类型的悬挂键, 相应的, 在态密度曲线上, 呈现出“双峰”结构, 这点和用其它比较复杂的方法获得的结果是一致的^[3, 4, 17].

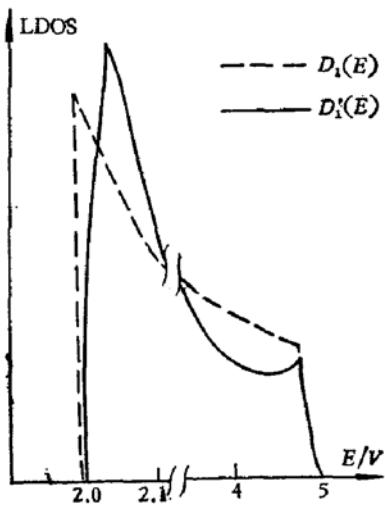


图 7 Si(111) 2×1 重构表面层的定域电子态密度(任意单位)

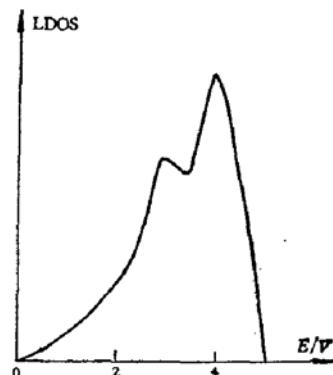


图 8 Si(100) 面的电子态密度
(任意单位)

2. Si(100) 面

可以选取恰当的能量零点,使 $U_0 = 0$,进而令 $U = 0$,仿上, $\rho = \sqrt{3}$,我们在 $\frac{1}{4}$ 的 Si(100) 面布里渊区内,计算了 121 个不等价的 \mathbf{k} 点,得到的结果如图 8 所示.

从图 8 中可以看出, Si(100) 面的态密度曲线,较之 Si(111) 未重构表面^[12]更偏离体的态密度曲线,这可以从 Si(100) 面具有较多的悬挂键得到解释,由于存在着较多的悬挂键,表面和体内进行电子交换的可能性增大,相应的,态密度的偏离也增大. 相应的两个尖峰,就是对应着两个悬挂键.

四、讨 论

1. 本文仅采用了 s 波一个波函数,依照文献 [15],应用 Weaire-Thorpe 变换,可推广到 sp^3 的情况中去. 这时,格林函数和传递函数都将是 4×4 的矩阵,要严格写出解析结果似较困难,但是,原则上,可以利用计算机,将格林函数和传递矩阵作为能量 E 和波矢 \mathbf{k} 的函数,贮存起来,然后对能量 E 和波矢 \mathbf{k} 逐点求解,求出我们所期待的表面电子态密度来.

2. 在 Si(111) 面 2×1 重构表面的计算中,在采用不等于零的 U_1 和 $U_{1'}$ 时发现,当 U_1 (或 $U_{1'}$) 增大时,在布里渊区的某些点上,表面能带将部分落人体能带中去,当 U_1 (以及 $U_{1'}$) 变到等于 V 时,对整个布里渊区,表面能带都将落到体能带中. 计算过程中还发现, U_1 (或 $U_{1'}$) 的增大,将使态密度的尖峰变宽变平. 类似的情况,在 Si(100) 面的计算中,也有所表现. 这一点,文献 [12] 也有报道.

3. 从 Si(100) 面的 $E(\mathbf{k})$ 表达式 (20) 中可以看出,作用参数 $\rho > 1$ 是必需的,否则,在布里渊区的某些点上,将得不到实的能量,这表明,在表面形成后,表面原子的相互作用变化是一个值得考虑的重要因素,文献 [12] 对 Si(111) 面也得到 $\rho > 1$ 的结论.

4. 最近有报道^[14], 有人对 Si(111) 面 2×1 重构表面的 LEED 实验结果进行了分析, 提出了与文献 [4] 不同的原子位移数据, 这对本文所描述的方法, 不会带来什么变化, 只需对之重新进行数值计算. 本文的目的是采用 TMG 方法处理重构表面问题, 数值计算仅是举例而已.

5. 在我们的计算中, 可以体会到, TMG 方法处理表面问题时, 可以采用真实的半无限大的表面模型, 较之其它表面模型, 例如薄片模型 (slab model) 等, 要显得合理些, 同时, TMG 方法在计算时, 逻辑性强, 图象清楚, 分析直观, 在原则上, 可以获得能带结构的解析表达式, 这些是某些其它方法所不具有的优点. 在处理表面问题中, 我们可以求出任意一层的电子态密度, 从表面直至体内, 加上所获得的关于传递矩阵的知识, 我们可以看出电子态密度是如何一层一层地变化.

但是, 应该指出, TMG 方法所获得的成套的联立方程的求解, 是十分繁复的, 特别是考虑了重构以及计入 sp^3 轨道后, 由于传递矩阵和格林函数都同时是 E, \mathbf{k} 的函数, 演算相当复杂, 在利用计算机时, 必须考虑到这些结果有一个大容量的内存问题. 要求得最后的定量结果, 并不是一件易事, 计算工作量将是很大的.

尽管如此, 在求解表面的问题时, TMG 方法仍不失为一种合理而且有效的计算方法.

作者对谢希德, 张开明, 陆栋老师的指导, 对中国科学院半导体研究所夏建白同志的富有建设性的意见, 谨表谢意.

参 考 文 献

- [1] A. Taloni & D. Haneman, *Surf. Sci.*, **10**, 215 (1968).
- [2] W. A. Harrison, *J. Vac. Sci. & Tech.*, **14**, 884 (1977).
- [3] M. Schluter et al., *Phys. Rev.*, **B12**, 4200 (1975).
- [4] K. C. Pandey & J. C. Phillips, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1450 (1975).
- [5] S. Ciraci & I. P. Batra, *Sol. Stat. Commun.*, **18**, 1149 (1976).
- [6] J. A. Appelbaum & D. R. Hamann, *Phys. Rev.*, **B12**, 1410 (1975).
- [7] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 1062 (1978).
- [8] J. A. Appelbaum et al., *Phys. Rev.*, **B11**, 3822 (1975).
- [9] G. P. Kerker et al., *Phys. Rev.*, **B17**, 706 (1978).
- [10] J. Pollman & S. T. Pantelides, *Phys. Rev.*, **B18**, 5524 (1978).
- [11] 有关 Si(100) 面的弛豫和重构的研究, 可参见
F. Jona et al., *J. Phys.*, **C10**, 167 (1977);
S. Y. Tong & A. L. Maldondo, *Surf. Sci.*, **78**, 459 (1978).
- [12] L. M. Falicov & F. Yndurain, *J. Phys.*, **C8**, 147 (1975); *J. Phys.*, **C8**, 1563 (1975).
- [13] F. Yndurain & L. M. Falicov, *J. Phys.*, **C8**, 1571 (1975).
- [14] R. Feder et al., *J. Phys.*, **C12**, L179 (1979).
- [15] D. Weaire & M. F. Thorpe, *Phys. Rev.*, **B4**, 2508 (1971).
- [16] D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B18**, 1800 (1978).
- [17] J. E. Rowe et al., *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 1333 (1974).

Electronic States of a 2×1 Reconstructed Si(111) Surface and of an Ideal Si(100) Surface

Fu Zhuowu

(Department of Physics, Pudan University)

Abstract

The electronic structures of a 2×1 reconstructed Si(111) surface and of an ideal Si(100) surface are studied with the "Transfer-Matrix Green Function" method (TMG) proposed by L. M. Falicov and F. Yndurain. The calculation is based on a simple model only and the results obtained are in fair agreement with that from other more sophisticated and time-consuming methods. Some problems about the selection of parameters are also discussed.