

# LEED 动力学计算的 BSN 近似法简介

胡 兹 蓓

(中国科学技术大学物理系)

低能电子衍射 (LEED) 及其动力学计算, 能在  $0.1\text{\AA}$  的误差范围确定表面每个原子的位置, 因而是当今最有力的表面结构分析手段. 随着表面科学发展, 表面结构分析面临着大量的多层表面结构、无序表面结构和复杂表面结构问题. LEED 的动力学计算量也日趋繁重, 往往超出了目前计算机许可的范围. 寻找有效的近似方法是 LEED 动力学计算迫在眉睫的任务.

超晶格表面 (with large-unit-cell superlattice) 和非通约表面 (incommensurate), 由于它在材料科学和催化机理上的应用背景, 近年来很为人们所重视. 然而其结构分析中的庞大计算量又使人望而生畏. 如果将每条由表面衍射生成的电子衍射束用一个平面波来表示, 那么一个正空间的二维点阵就对应了一个平面波组 (a beam set). 我们将对应衬底格子和超格子的衍射束组分别用  $\{G\}$  和  $\{g\}$  表示. 一个超格子单胞面积是一个衬底格子面积的  $M$  倍, 其  $\{g\}$  束组的电子束数将是  $\{G\}$  束组的  $M$  倍. 计算超格子层的衍射矩阵将是计算衬底的衍射矩阵的  $M^2$  倍. 而每一条  $g_i$  都以一个特定角射入衬底, 产生一套  $g_i + \{G\}$  束组. 这样整个表面衍射过程将有  $M$  套束组参与. 非通约表面的动力学计算就更复杂. 因为, 无法用衬底的衍射束简单地表示吸附层的衍射束, 所以经过反复散射后将有无套束组参与此表面的衍射过程. 这样大的计算量是无法付诸实践的.

尽管有许多套束组参与了超晶格和非通约表面的衍射, 但它们对最终结果的贡献并不相同. 在计算中只考虑那些起主要作用的束组, 忽略那些次要的束组, 这就是束组忽略法 (beam set neglect method), 简称 BSN 近似法的基

本思想.

## 一、BSN 近似法

在动力学计算中, 当入射角与样品的格子结构确定之后, 束组就确定了, 层的衍射矩阵也就确定了. 我们可以把表面分成两大层, 一层为超格子层, 一层为衬底层, 即把衬底看成一个很厚的原子层. 它们各有自己的格子和束组. 由于零度角散射强度远大于其他角度, 我们定义所有非零度角散射为偏射. 把所研究的出射束强度, 按其在吸附层与衬底间的偏射次数展开, 并称偏射次数为散射序数, 那么散射序数越高的项对结果的贡献越小, 而计算量越大.

N. Stoner, M. A. Van Hove, S. Y. Tong 和 M. B. Webb 在 1978 年计算了在一级、二级、三级散射近似下, Xe/Ag(111) 系统的各条衍射束的  $I-V$  曲线<sup>[1]</sup>. 计算结果表明, 如只考虑一级散射, 计算结果误差较大, 但包括二级散射与包括三级散射的结果相差无几. 这样就产生了略去三级散射的近似计算. 由于在二级近似的计算中只需几套关键的束组, 而忽略其它束组的作用, 故称为束组忽略近似法, 即 BSN 法.

## 二、用 BSN 法计算的各衍射束

下面我们具体分析一下 BSN 法计算中各衍射束的成分、计算量和提供的信息.

### 1. 镜射束, 即 $(0, 0)$ 束

在二级近似下, 镜射束由两条反射束干涉而成: 一条直接由超格子层反射而成, 另一条是透过超格子层由衬底反射而成. 超格子层和

衬底间的层间距决定了这两条反射束的程差,因而镜射束的  $I-V$  曲线对这层间距最敏感.当表面为非通约的吸附层时,一般吸附层和衬底的横向结构可由衍射花样决定,用镜射束的  $I-V$  曲线确定层间距,有着重要的现实意义.

### 2. 对应衬底结构的衍射束 $G_i$

在二级近似下,计算  $G_i$  束时只需考虑  $\{G\}$  束组,所有  $g_i + \{G\}$  束组的贡献均被忽略. $G_i$  的  $I-V$  曲线主要由衬底各层的衍射束相干产生,它主要说明了衬底的结构和吸附层对其影响不大,因此,可用吸附前后  $G_i$  束的变化来判断吸附前后衬底内的结构变化.

### 3. 对应超格子的衍射束 $g_i$

每一  $g_i$  主要由  $g_{i1}$   $g_{i2}$   $g_{i3}$  三部分相干而成. $g_{i1}$  由超格子层直接衍射而得; $g_{i2}$  由衬底反射的(0,0)束在超格子层衍射而得; $g_{i3}$  由超格子层的衍射束经衬底反射而得. $g_i$  的计算需要用  $\{G_i\}$  束组和  $g_i + \{G\}$  束组.它的  $I-V$  曲线为分析复杂的吸附层结构提供了关键信息.

从上面分析可知,用BSN法计算时只需用

少数几个束组,因而计算量是有限的,然而提供的信息却是丰富的.

## 三、应用与前景

1983年, Van Hove 等人用BSN法分析了  $C_6H_6/Rh(111)$  表面,并与精确计算法作了对比,结果表明此方法是有效的,结果的精度是令人满意的<sup>[1]</sup>.

1985年,笔者与 Van Hove 将此理论用到石墨与  $Pt(111)$  非通约表面结构分析上,再次获得成功<sup>[2]</sup>.

当然,BSN法作为一种近似处理法,其有效性和局限性都有待于在更广泛的应用中予以检验,同时许多具体处理方法也有待进一步完善.

[1] N. Stoner et al., *Phys. Rev. Lett.*, **40**(1978), 243.

[2] M. A. Van Hove et al., *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 778.

[3] Hu Zi-Pu et al., *Surf. Sci.*, **180** (1987), 433.

(上接第136页)

的学科分支.由于这方面的深入,现在已发展到超聚合物(superpolymer)、极弱固体(ultra-weak solid)和聚集物(aggregate)的研究.当某些物质的微粒的粒度小至100 nm或更小时,它们可象原子或分子那样成为一种物质单元,在一定的条件下,它们有可能聚集起来形成“柔软”的链和周期性的类格子态以及具有部分几何结构的实体,这在基础物理及应用物理研究中都有重大意义.

同技术和应用的迅速发展相比,理论的发展很慢.目前还没有较成熟的理论,有一些理论模型,但只能解释部分实验现象(粒子间的相

互作用及它们的形成等),并且实验研究也不很充分.从已经取得的应用成果看,这方面的研究是固体物理及工业开发研究的非常有用的研究领域.目前,日本、美国在这一领域的研究已处于领先地位,他们不但在基础物性的研究方面,而且在工业开发的研究和应用上都有突出的成就.目前,国内这方面的研究,尤其是基础物性的研究还不充分.

[1] T.C. Lubensky, *Phys. Today*, **37-10** (1984), 44.

[2] 和田 伸彦, *日本の科学と技術*, **25**(1984), 22.

[3] 小沢英一, *日本の科学と技術*, **25**(1984), 52.

[4] S. Iijima, *Proc. XIth Int. Cong. on Electron Microscopy, Kyoto*, (1986), 87.