

## 半导体电子态理论简介 (II)

夏 建 白

(中国科学院半导体研究所)

### 三、半导体表面

半导体表面研究的现象包括理想表面, 表面的弛豫和重构, 以及表面吸附等. 理想表面是假设晶体断裂后, 它的表面原子的排列和晶体内部相同. 实际情况往往不是这样, 由于在表面上原子所受的力与晶体内部不同, 它的运动自由度又较大, 因此往往会发生表面原子位移. 如果这种位移不破坏晶体平行于表面的平移对称性, 则称为弛豫; 如果破坏了这种平移对称性, 并形成一种新的平移对称性, 则称为重构.

由于半导体表面的存在, 晶体在表面方向上的平移对称性被破坏了, 但仍保留平行方向的平移对称性. 根据布洛赫原理, 平行方向的波矢  $k_{\parallel}$  仍是一守恒量, 但在垂直方向上,  $k_{\perp}$  不是守恒量.

在表面问题中, 经常遇到的两个重要概念是投影能带和局域态密度. 在三维晶体中, 能带是三维的. 对应于布里渊区中的每一个波矢  $\mathbf{k}$ , 有一个能量  $E_n(\mathbf{k})$ , 其中  $n$  代表不同的能带, 例如价带和导带 (见图 1). 投影能带就是将三维能带投影到二维布里渊区上. 对应于二维布里渊区的每一个  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , 三维能带有一系列能量  $E_n(\mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp})$  ( $-\frac{\pi}{a} < k_{\perp} < \frac{\pi}{a}$ ). 将  $E_n(\mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp})$  画成  $\mathbf{k}_{\parallel}$  的函数, 得到的投影能带如图 7 所示. 图 7 中的阴影区域代表  $k_{\perp}$  取不同值时的能量范围. 在表面情况下, 虽然  $k_{\perp}$  不是守恒量, 但由体内大部分原子决定的能级仍处在  $k_{\perp}$  能带决定的阴影区域内. 另一方面, 以表面原子为主的能级往往位于阴影区域之外, 这就是

物理

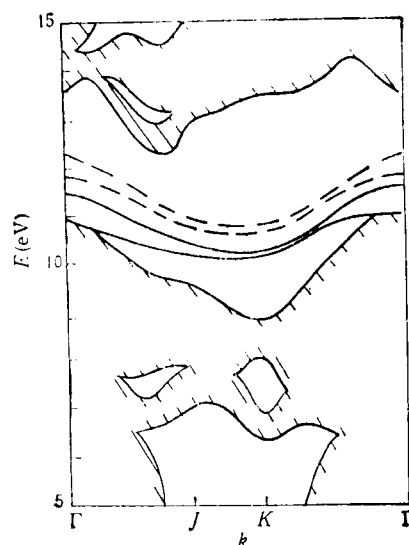


图 7 Si(111) 面的投影能带和表面能级  
(虚线为弛豫表面能级)

表面能级 (见图 7 的实线). 如果以表面原子为主的能级在阴影区域之内, 则称为共振能级.

态密度是一个比能带更为普遍的概念. 能带仅在具有平移对称性的晶体中存在. 对一个没有平移对称性 (或部分失去, 例如表面) 的系统, 波矢  $\mathbf{k}$  (或  $k_{\perp}$ ) 不再守恒. 为了表征这些系统中本征能级的特性, 引入态密度的概念, 即

$$N(E) = \frac{1}{N} \sum_n \delta(E - E_n),$$

也就是单位能量间隔内能级的数目. 态密度的概念对晶体当然也是适用的. 例如对于前面讨论的一维线性链模型,

$$E_{nk} = E_0 \pm \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + 2V_1V_2 \cos ka},$$

其中  $E_0$  是一常数. 令  $E_0 = 0$ , 表示取禁带的中心为能量原点;

$$N(E) = \frac{1}{2N} \sum_{nk} \delta(E - E_{nk})$$

$$= \frac{a}{2\pi} \left| \frac{dk}{dE} \right|$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{|E|}{\sqrt{4V_1^2 V_2^2 - (E^2 - V_1^2 - V_2^2)^2}}$$

在表面问题中，常用到局域态密度。如果对应于系统能级  $E_n$  的波函数为  $\psi_n$ ，而原子  $a$  的原子波函数为  $\phi_a$ ，则在  $a$  原子上的局域态密度定义为

$$n_a(E) = \sum_n \langle \phi_a | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \phi_a \rangle \delta(E - E_n)$$

$\delta$  函数前的因子代表  $a$  原子波函数在第  $n$  个态中所占的比例。对于理想晶体，局域态密度等于晶体态密度  $n_a(E) = N(E)$ 。但对于表面系统，各层原子的局域态密度是不同的。

### 1. 平板模型

现在讨论半导体 Si 的 (111) 表面<sup>[43]</sup>。表面原子有一个键断裂，成为悬键，伸向空间。其它三个键与体内原子相连。在平行于表面的平面上看，原子成六角形排列 [见图 8(a)]。取平面

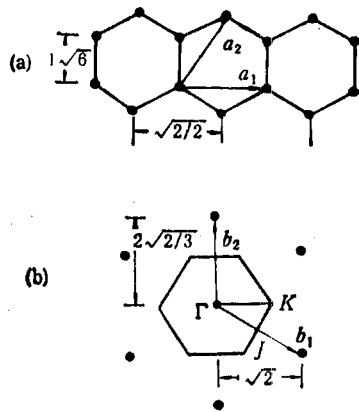


图 8

(a) 表面原子排列; (b) 二维布里渊区

原胞的基矢为  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ ,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} a \mathbf{i}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{2}}{4} a (\mathbf{i} + \sqrt{3} \mathbf{j})$$

由此可求得二维布里渊区如图 8(b) 所示，上面对称点。

取表面波函数

$$\bar{\psi} = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^4 C_{\alpha l} \left[ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c^{i \mathbf{k}_{\parallel}} \cdot \mathbf{R}_{il}^{\alpha} \right] \cdot \phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{il}^{\alpha})$$

其中方括号内的波函数是每一层内的紧束缚波函数， $\alpha$  是原子波函数的种类， $l$  代表层数。如果取  $N$  层的平板，则总波函数是  $N$  层紧束缚波函数的线性组合。

将表面波函数代入薛定谔方程，相互作用参量可以取经验紧束缚参数，也可以用真实的原子波函数计算。最后求得的表面能谱如图 7 所示<sup>[43]</sup>，其中横坐标是  $\mathbf{k}_{\parallel}$ ，沿着二维布里渊区的对称点变化。对每一个  $\mathbf{k}_{\parallel}$ ，得到一系列能级，大部分都落在体能带范围(投影能带)内，只有两个落在禁带内。它们就是表面能级。因为平板有两个表面，所以有两个表面能级。由于平板不够厚，两个表面间有相互作用，能级分开。虚线是表面原子弛豫后(向内移  $0.33 \text{ \AA}$ )的表面能级。还可计算各层原子的局域态密度，证明表面能级主要是表面原子的悬键产生的。

### 2. 格林函数方法

平板模型只是表面的近似。与集团模型一样，由于计算的限制，它不能取得无限大。原则上讲，格林函数方法就能把平板模型扩展到无穷大。为了说明问题，我们考虑一维模型(见图 9)。每一个原子代表一原子层，“表面”在原子键 1 处。平板模型就是取若干个原子层，这样就有两个“表面”。格林函数方法就能考虑整个半无穷链组成的体系。

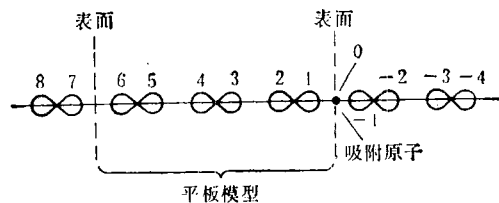


图 9 模拟表面的一维线性链模型

在用格林函数方法之前，介绍下面两个公式。

(1) 态密度与格林函数虚部的关系:



定于  $E_s$  和  $V_s$ 。

格林函数方法虽然是严格的,而且形式也很漂亮,但实际计算起来工作量很大。首先,格林函数、传输函数都变成矩阵形式。传输矩阵的方程变成非线性矩阵方程,需用迭代方法求解,同时对每一个  $E$  和  $k_{||}$  值都要从头计算一次。因此,只有很少人用这方法做过实际的计算。

由于表面是自由的,表面势场与晶体内部

势场有很大的区别。不仅电子分布情况改变了,而且表面原子的平衡位置也改变了,这就是弛豫和重构。另外表面原子的吸附也不一定在顶位,也可以在桥位等各种位置。这些都是由总能量决定的,平衡位置在总能量最低的位置。目前有很大一部分理论工作是采用集团模型进行自洽计算,求总能量以确定表面原子或吸附原子的平衡位置等。

[13] 夏建白,物理学报,33(1984),144.

## 脉冲星给双星演化提供了新的信息

1967年脉冲星的发现,与类星体和宇宙微波背景辐射的发现一道,被称作近代天文学的三大发现之一,这在当时曾引起轰动。二十年后,由于一批转动极快的毫秒脉冲星的发现,又一次激起了人们对脉冲星研究的兴趣。近年来,寻找和研究毫秒脉冲星已成为脉冲星研究的热点。人们最关注的问题是,毫秒脉冲星是如何演化而来的。弄清这个问题,可为认识双星系统的演化提供一些重要的线索。

1975年,人们发现了第一颗X射线脉冲双星,其转动周期是59ms。它的X射线脉冲发射是来自伴星吸积的物质所释放的引力能。由于中子星从伴星吸积物质,所以其角动量将增加,因而,X射线脉冲星的转动周期将越来越小,而不是象射电脉冲星那样,转动周期越来越大。

1982年,人们发现了第一颗毫秒脉冲星,其自转周期为1.6ms。这颗脉冲星的自转周期非常稳定,几乎和原子钟一样。由此可以推知这颗脉冲星的年龄大约为 $10^8$ 年。使天文学家感到惊奇的正是这颗既不年轻也不是处在双星系统之中的毫秒脉冲星。那么是什么原因使得这颗毫秒脉冲星的转速如此快呢?如果象很多人猜测的那样,这颗脉冲星也曾经处于双星系统之中,它对伴星物质的吸积所伴随的角动量转移使它得到这样高的转速,那么现在它的伴星又到哪儿去了呢?这第一个被发现的毫秒脉冲星的演化之谜至今并未完全解开。

普林斯顿大学的科学家们发现了一个处于

双星系统之中的毫秒脉冲星。此双星系统的轨道平面侧对我们,所以其伴星与脉冲星可以交食而被观测到。通过光学和射电观测,可以确定出伴星的质量仅为太阳质量的2%。这颗脉冲星的磁场强度约为 $10^8$ G。也就是说,这颗脉冲星也是年龄相当老的一颗脉冲星,只不过它的伴星仍然存在。

1987年,天文学家在非常老的球状星团中心发现了毫秒脉冲星。迄今为止已在四个球状星团中发现了五颗毫秒脉冲星,其中有的仍然处于双星系统之中。有人认为,可能还有更多的这类毫秒脉冲星有待发现。但在球状星团中能够作为毫秒脉冲星前身的低质量X射线脉冲双星可能太少。所以,有人提出,当白矮星吸积的物质超过一定质量极限而塌缩时,会马上形成毫秒脉冲星。

与此同时,近一年来,天文学家一直在期待着由超新星1987A的爆发所遗留下来的最年轻的脉冲星的诞生。几个小组一直在监测着1987A的光变曲线。最近,在智利托洛洛山顶上的泛美天文台终于发现了超新星1987A所留下的脉冲星。这是人类第一次观测到脉冲星的诞生。这颗脉冲星的转动周期为0.5ms,是迄今发现的转速最快的脉冲星。当然,它的周期的稳定性不会象别的毫秒脉冲星,这是由于它是一颗极年轻的脉冲星。

(夏晓阳根据 Physics Today 1988

第8期第20页编译)