

参 考 文 献

- [1] J. Kane, H. P. Schweizer, W. Kern, *Thin Solid Films*, **29**(1975), 155.
- [2] P. Nath, R. F. Bunshah, *Thin Solid Films*, **69**(1980), 63.
- [3] A. Hjorteborg, I. Hamberg, C. G. Granqvist, *Thin Solid Films*, **90**(1982), 323.
- [4] M. I. Brett, R. W. McMahon, J. Affinito et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **1**(1983), 352.
- [5] J. C. Manificier, J. Gasiot and J. P. Fillard, *J. Phys.*, **E9**(1976), 1002.
- [6] R. Swanepoel, *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, **16**(1983), 1214.
- [7] H. Demiryont, James R. Sites, Kent Geib., *Applied Optics*, **24-4**(1985), 490.
- [8] 陈烈敏、章壮健等, 薄膜科学与技术, **5-4**(1992), 41.
- [9] 黄跃文、章壮健, 真空科学与技术, **13-5**(1993), 330.
- [10] Zeng Youyi, Zhang Zhuangjian et al., *Thin Solid Films*, **214**(1992), 235.
- [11] Zeng Youyi, Zhang Zhuangjian et al., *Thin Solid Films*, **221**(1992), 235.
- [12] S. Witanachchi, S. Patel, H. S. Kwok et al., *Appl. Phys. Lett.*, **54**(1989), 578.
- [13] M. Migliuolo, A. K. Stamper, D. W. Greve et al., *Appl. Phys. Lett.*, **54**(1989), 859.
- [14] S. Miura, T. Yoshitake, S. Matsubara, et al., *Appl. Phys. Lett.*, **53**(1988), 1967.

最新的 Van Hove LEED 程序库*

胡 晓 明 林 彰 达

(中国科学院物理研究所, 中国科学院表面物理
国家重点实验室, 北京 100080)

M. A. Van Hove

(美国加利福尼亚大学劳伦斯伯克利实验室材料科学部)

摘 要 用低能电子衍射(LEED)强度-电子能量曲线($I-V$ curve)确定晶体表面结构是目前国际上广泛采用的一种方法。由于理论计算的复杂性,充分利用世界上现有的计算程序已显得十分必要,本文对 Van Hove 的 LEED 程序库及其应范围和特点作一简单的介绍。

关键词 低能电子衍射, 张量 LEED 方法, 计算机程序库

低能电子衍射(low energy electron diffraction, LEED)是研究晶体表面结构的一种经典的方法^[1],特别是电子衍射斑点强度随电子能量的变化曲线($I-V$ curves)在实验上可用多种方法进行测量,在理论上这些曲线可用不同的表面结构模型及理论近似进行模拟^[2],将理论与实验比较即可得到符合最好的表面结构模型,从而确定所研究的表面结构。虽然在实验上人们早已可以对晶体表面的 LEED $I-V$ 曲线做精确测量,但理论上由于低能电子衍射中电子多重散射及表面对多个原子坐标变化计算的复杂性,人们一直难以在短时间内得到所有可

能的表面结构模型的理论计算曲线,因此这一方法显得比较繁琐。目前,全动力学张量微扰法(dynamical tensor LEED)在国际上获得了广泛的应用,这一方法的关键在于对一参考结构做全动力学计算的同时,建立一个可用于对参考结构做微扰计算的张量,因而所有与参考结构类似的表面模型不需要重新计算,而只需采用所建立的张量,便可对几十个表面结构参数在参考结构附近的变化做快速计算并与实验曲

* 1995年4月27日收到初稿,1995年8月2日收到修改稿。

线比较,这种方法可较迅速地确定晶体表面的吸附结构及表面的弛豫变化.我们中国科学院表面物理实验室在 Van Hove 的支持帮助下,利用现有的 LEED *I-V* 测量装置及 Van Hove 提供的 Tensor LEED 计算程序研究了硅单晶表面的吸氢结构^[3],获得了满意的结果,现将 Van Hove 的 LEED 程序库介绍给大家,以期使 LEED *I-V* 这种表面结构研究方法在我国获得广泛的应用. Van Hove LEED 程序库主要有以下几个部分:

(1)常规的 LEED 程序(conventional LEED programs, the old Van Hove/Tong package^[2]).早期做过 LEED 理论计算的人都熟悉这一套已发表的程序,它包含了多种可选择的近似作为子程序,使得较复杂的结构在没有自动搜索的情况下得以确定.但是,用户在使用中需要理解各个子程序的作用以应用于特定的结构.为了便于用户使用,程序库提供了 100 多个适用于各种不同表面结构的主程序(使用一个共同的子程序库),这些例子包括了大部分简单结构,使用户稍加改动便可应用于其他的结构.这套程序的缺点是需要对主程序做修改、调试,另外由于在确定表面结构时需对所有可能结构做完整的动力学计算,因此需要占用大型计算机的大量机时.

(2)可广泛用于多种表面结构研究的全自动对称张量 LEED 程序(LEEDSATL: symmetrized automated tensor LEED programs for most applications, the Barbieri/Van Hove package^[4]).这一程序组是 Barbieri/Van Hove 软件包的核心,是由 Barbieri 于 1992 至 1995 年间在较早的全自动张量 LEED 程序(ATLEED: automated tensor LEED programs, the old version^[5,6])基础上发展建立的,它在 Van Hove/Tong 的程序库基础上增加了张量 LEED 计算及表面结构自动搜索机制,从而使原有的对不同表面结构进行独立的全动力学计算方法有了很大改进,它可被应用于有序的表面结构,也可对无序吸附层进行模拟,它可以对 30 个以上的表面原子坐标做自动搜索,并用可靠性因

子^[7]判断最佳结构.它可对晶体表面的对称性进行充分利用,因此其运算速度较 ATLEED 又有较大提高.这一程序组不需用户做很大改动,因而使用简单,它在大型计算机工作站上已经过严格测试,并可在 486PC 上运行.这一程序组作为主要应用程序在不久的将来会有进一步的发展.

(3)可用于复杂表面结构研究的全自动对称张量 LEED 程序(LEEDSATC: symmetrized automated tensor LEED programs for very complex structures, the Barbieri/Van Hove package^[4]).这一程序组是 Barbieri 在上述 LEEDSATL 基础上于 1994 年建立的,可用于计算非常复杂的表面结构,它与 LEEDSATL 的主要区别在于可避免储存多余的变量从而充分利用计算机的内存及其他资源,这一程序组在大型计算机工作站上对 Si(111)-(7×7)及其他一些复杂结构已进行了成功的检验.

(4)可对多种电子入射角及多种表面共存结构进行同时计算的非对称全自动张量 LEED 程序(LEEDATLM: non-symmetrized automated tensor LEED programs for simultaneous optimization of multiple angles of incidence and/or of different coexisting surface structures, the Barbieri/Van Hove package^[4]).这一程序组由 Barbieri 在 ATLEED 基础上于 1993-1994 年建立,用于多角度及多种表面结构共存情况下的理论计算,它的原理是:首先用全动力学方法对一参考结构做不同入射角及不同表面结构的计算,然后用张量 LEED 方法对微扰后的结构进行不同入射角及不同表面结构共存的模拟,这一程序组的检验工作目前还不很完善.

(5)用于研究台阶表面的 LEED 程序(steped-surface LEED programs^[8,9]).由 Zhang 及 Rous 于 1989-1991 年间建立,用于处理层间距较小的台阶表面,它与 ATLEED 结合,可研究表面的横向及纵向弛豫变化,程序在电子能量大于 100eV 时的收敛可能会发生问题,需要人为中断处理.

(6)用于计算散射相移的程序(the new

Barbieri/Van Hove phase shift programs). 这是 Barbieri/Van Hove 程序库中新的完整的用于 LEED 计算输入的散射相移计算程序,它包括了“Cavendish”,“Williams”及“relativistic”等多种近似方法.

以上简单地介绍了 Van Hove LEED 程序库的主要内容,希望能引起国内同行的重视,需要进一步了解情况的用户可与本文作者及 Van Hove 直接联系.

参 考 文 献

[1] J.B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction*, Academic

Press, London, (1974).

- [2] M. A. Van Hove and S. Y. Tong, *Surface Crystallography by LEED*, Springer-Verlag, Heidelberg, (1979).
- [3] Xiaoming Hu and Zhangda Lin, *Phys. Rev. B*, **51**(1995), 10164.
- [4] A. Barbieri and M. A. Van Hove, private communication.
- [5] P. J. Rous, M. A. Van Hove and G. A. Somorjai, *Surf. Sci.*, **226**(1990), 15.
- [6] A. Wander, M. A. Van Hove and G. A. Somorjai, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 626.
- [7] M. A. Van Hove, W. H. Weinberg and C. -M. Chan, *Low-Energy Electron Diffraction*, Springer-Verlag, Heidelberg, (1986).
- [8] X.-G. Zhang, P. J. Rous, J. M. MacLaren et al., *Surf. Sci.*, **239**(1990), 103.
- [9] X.-G. Zhang, M. A. Van Hove et al., *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 1298.

(上接第 423 页)条件. 在火法冶金中,日本在这方面取得了很好和效果. 对于湿法冶金,工业上应用还只限于搅拌及控制、测量等应用. 在研究方面对于湿法冶金单元过程如萃取、过滤、沉淀、结晶等也取得一定成果. 另外,磁处理应用于湿法冶金工业中还具有防垢除垢效果,并利于防腐^[8]. 随着磁性材料的发展,用永磁材料构成的稳恒磁场不消耗能源、无污染、寿命长、维修方便等都有利于工业应用. 对溶液的性质和磁处理方式相结合进一步研究磁处理作用于冶金过程的宏观规律及微观机理具有重要的理论和实践意义,是一个具有诱人前景的领域.

参 考 文 献

- [1] 宋大有,稀有金属, No.2(1995), 18.
- [2] 孙茂友等,稀有金属, No.4(1991), 10.
- [3] M. Mheric, *J. Cryst. Growth*, **71**(1985), 63.
- [4] 陈昭威,物理, **21**(1992), 109.
- [5] 高春满,第四届物理化学学术论文集(三),中国金属学会, (1982), 8.
- [6] R. E. Borton, J. Daly, *Trans. Faraday, Soc.*, **67**(1971), 1291.
- [7] В. Е. Терновчев, В. М. Пушачев, *Очистка Промышленных Сточных Вод*, Москва, Издательство Будельвельник, (1986), 20.
- [8] 耿殿雨,磁能应用技术, No.4(1990), 16.
- [9] 张志东等,磁能应用技术, No.2(1990), 2.