

GaAs (110) 面的紧束缚计算

徐 永 年

(复旦大学物理系)

1981 年 1 月 27 日收到

提 要

本文研究了 GaAs (110) 弛豫表面的紧束缚计算, 采用了有饱和的 slab (薄片) 模型, 来模拟半无限大的晶体. 通常的 slab 模型有两个表面, 本模型与其不同之处在于用类 As 和类 Ga 原子来饱和伸向体内的悬挂键, 使之只保留一个表面, 从而大大降低久期矩阵的阶数. 从计算的表面定域态密度表明, 采用五层的有饱和的 slab 模型, 就可以得到较好的结果.

一、引 言

一般的紧束缚计算, 都采用所谓的 slab 模型来模拟半无限大的晶体, 即把晶体看成由很多层所组成, 每层具有二维周期性^[1-6]. 用 slab 模型, 就有上下两个表面, 它对于中心面是对称的, 这上下两个表面附近的电子态是类似的. 本文对下表面层用类 As 和类 Ga 原子来饱和, 用以模拟体内的情况, 这样的处理只保留了一个表面, 从而可以减少 slab 模型的层数. 本文用有饱和的 slab 模型以及通常的 slab 模型研究了 GaAs (110) 面沿 $[1\bar{1}0]$ 方向的转动弛豫, 并选用两组不同参数进行了计算^[5,11,12]. 计算结果表明, 有饱和的 slab 模型可以以较少的计算量得到较好的结果.

二、计算模型和方法

紧束缚方法用于表面计算已有很多文章^[4,5,8-11]. 图 1 示出了 GaAs (110) 面和二维原胞. 图 2 示出了有饱和的 slab 模型.

每个原子选用四个轨道, 即只考虑感兴趣的最外层的 sp^3 杂化轨道, 以此构成平面的 Bloch 和为

$$\Phi_{p,m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\rho_l} e^{i\mathbf{k} \cdot \rho_l} \varphi_p(\mathbf{r} - \rho_l - \mathbf{z}_m),$$

其中 ρ_l 为平面格矢, $\mathbf{z}_m$ 为垂直平面的矢量, $p = 1, 2, \dots, 8$ 是 As 和 Ga 原子的轨道指标, m 是层的指标. 通常, 假定 φ_p 满足 Löwdin 正交化. 将波函数取为

$$\phi_{j,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^8 \sum_{m=1}^{N_0} C_{jp m}(\mathbf{k}) \sum_{\rho_l} e^{i\mathbf{k} \cdot \rho_l} \varphi_p(\mathbf{r} - \rho_l - \mathbf{z}_m),$$

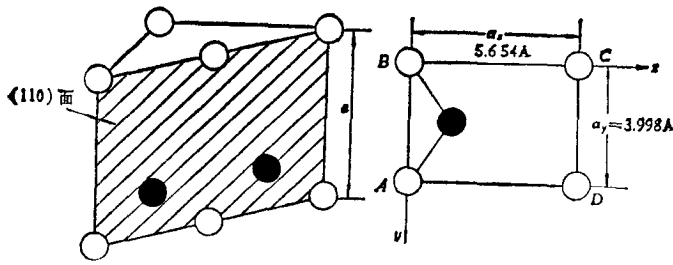


图1 GaAs (110)面和二维原胞 $ABCD$ a ——晶格长度;
 a_x, a_y ——二维原胞基矢

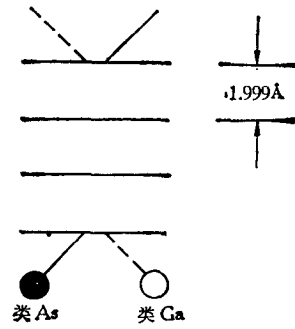


图2 GaAs (110) 面有饱和的
slab 模型

代入薛定谔方程 $H\psi = E\psi$ 后,可得久期方程

$$|\langle p', m' | H | p, m \rangle - E(\mathbf{k}) \delta_{p'p} \delta_{m'm}| = 0,$$

其中,

$$\langle p', m' | H | p, m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\rho_l} \sum_{\rho_{l'}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\rho_l - \rho_{l'})} \cdot \int \varphi_{p'}^*(\mathbf{r} - \rho_{l'} - \mathbf{z}_{m'}) H \varphi_p(\mathbf{r} - \rho_l - \mathbf{z}_m) d\mathbf{r},$$

利用晶体的对称性,只考虑最近邻的相互作用,经过冗长计算,可得哈密顿量 H 的矩阵形式如下:

	I	II	III	IV	V (饱和层)
I	$E_A \quad H_L$ E_C	$0 \quad H_E$ $H_D \cdot \gamma \xi \quad 0$			
II		$E_A \quad H_L$ E_C	$0 \quad H_E \gamma^* \xi^*$ $H_D \quad 0$		
III			$E_A \quad H_L$ E_C	$0 \quad H_E$ $H_D \gamma \xi \quad 0$	
IV				$E_A \quad H_L$ E_C	H_M H_N
V (饱和层)					H_P

I, II, III, IV 是层的指标, V 是饱和层

其中,

$$E_A = \begin{pmatrix} A_1 & A_3 & A_3 & A_3 \\ A_3 & A_1 & A_3 & A_3 \\ A_3 & A_3 & A_1 & A_3 \\ A_3 & A_3 & A_3 & A_1 \end{pmatrix}, \quad E_C = \begin{pmatrix} A_2 & A_4 & A_4 & A_4 \\ A_4 & A_2 & A_4 & A_4 \\ A_4 & A_4 & A_2 & A_4 \\ A_4 & A_4 & A_4 & A_2 \end{pmatrix}, \quad H_E = \begin{pmatrix} A_9 & A_8 & A_7 & A_8 \\ A_8 & A_9 & A_7 & A_8 \\ A_8 & A_8 & A_7 & A_7 \\ A_8 & A_6 & A_5 & A_6 \end{pmatrix},$$

$$H_D = \begin{pmatrix} A_5 & A_6 & A_6 & A_6 \\ A_7 & A_9 & A_8 & A_8 \\ A_7 & A_8 & A_8 & A_9 \\ A_7 & A_8 & A_9 & A_8 \end{pmatrix}, \quad H_L = \begin{pmatrix} A_5 & A_6 & A_6 & A_6 \\ A_7 & A_9 & A_8 & A_8 \\ A_7 & A_8 & A_8 & A_9 \\ A_7 & A_8 & A_9 & A_8 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_9 & A_7 & A_8 & A_8 \\ A_6 & A_5 & A_6 & A_6 \\ A_8 & A_7 & A_8 & A_9 \\ A_8 & A_7 & A_9 & A_8 \end{pmatrix} \cdot \eta^*,$$

$$H_M = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & K_{GP} \cdot A_5 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ K_{AP} \cdot A_5 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_P = \begin{pmatrix} K_A \cdot A_1 & 0 \\ 0 & K_G \cdot A_2 \end{pmatrix},$$

$$\xi = e^{ik_x \cdot a_x}, \quad \eta = e^{ik_y \cdot a_y},$$

$$A_1 = \langle 1|H|1 \rangle, \quad A_2 = \langle 5|H|5 \rangle, \quad A_3 = \langle 1|H|2 \rangle,$$

$$A_4 = \langle 5|H|7 \rangle, \quad A_5 = \langle 1|H|5 \rangle, \quad A_6 = \langle 1|H|7 \rangle,$$

$$A_7 = \langle 5|H|3 \rangle, \quad A_8 = \langle 2|H|6 \rangle, \quad A_9 = \langle 2|H|7 \rangle,$$

1, 2, ..., 8 是轨道指标, 见图 3. $A_1, A_2, \dots, A_9$ 是作用积分, 在紧束缚方法中用参数代替, 与饱和有关的相互作用矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle ⑦|H|⑦ \rangle &= K_G \cdot \langle 5|H|5 \rangle = K_G \cdot A_2, \\ \langle ③|H|③ \rangle &= K_A \cdot \langle 1|H|1 \rangle = K_A \cdot A_1, \\ \langle ⑦|H|4 \rangle &= K_{GP} \cdot \langle 5|H|1 \rangle = K_{GP} \cdot A_5, \\ \langle ③|H|8 \rangle &= K_{AP} \cdot \langle 5|H|1 \rangle = K_{AP} \cdot A_5, \end{aligned}$$

K_G, K_A, K_{GP}, K_{AP} 为一些适当的参数. 图 4 示出了饱和模型.

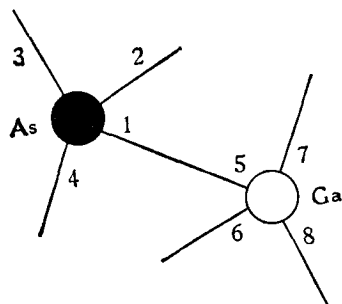


图 3 As 和 Ga 原子的轨道指标

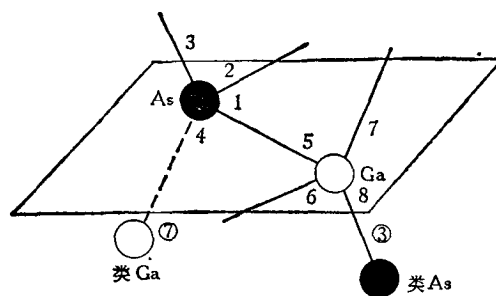


图 4 用类 As 和类 Ga 原子饱和的简单模型

三、结 果

采用键长可变的转动弛豫模型, 选用两组参数, 如表 1 所示.

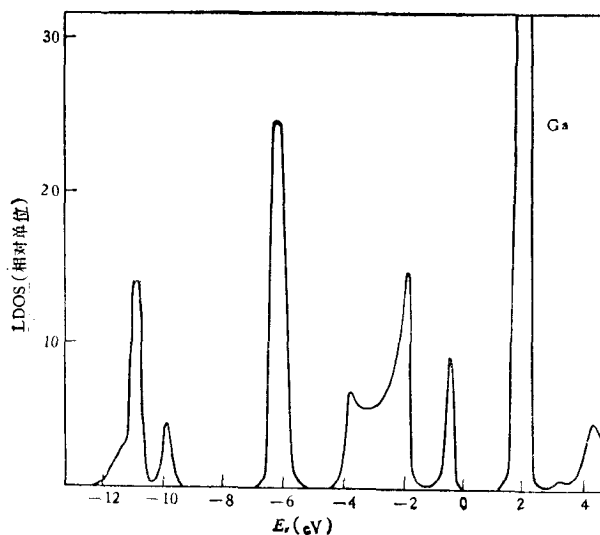
表 1 两组 $A_1, A_2, \dots, A_9$ 参数

(单位: eV)

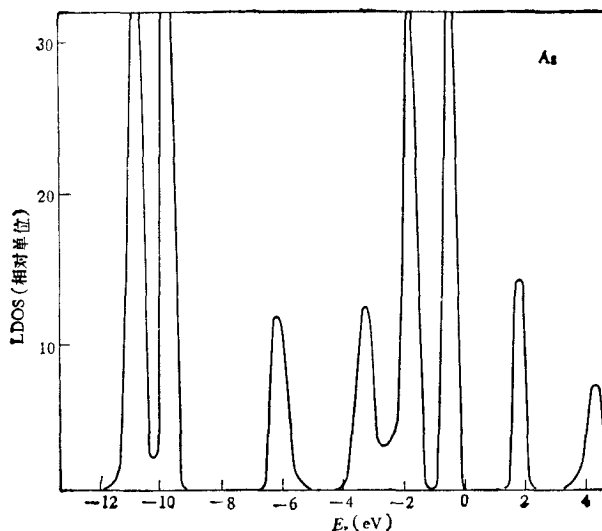
A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8	A_9	
-0.98	2.59	-2.42	-1.61	-5.07	-0.26	0.03	-0.46	0.58	[11]
-1.09	1.81	-2.37	-1.67	-4.97	-0.09	0.28	-0.4	0.057	{5, 12}

在表面处的参数值与体内一样,但考虑到有弛豫影响,使参数值按 $1/d^2$ 律变化. 对 GaAs(110) 面沿 $[1\bar{1}0]$ 方向转动,考虑了旋转 18° 和 26.4° 两种情形,作了定域态密度的计算.

当选用第一组参数以及 18° 的弛豫模型,取 $N_0 = 5$, $K_G = K_A = 0.3$, $K_{GP} = K_{AP} = 1$ 时,所得的表面层的定域态密度由图 5 所示. 结果表明,由 Ga 原子的悬挂键引起的空的表面态已经完全移出禁带而进入导带底以上,由 As 原子悬挂键引起的占有态也被推到价带顶附近,即禁带中不存在表面态. 这结果与一些作者的理论计算以及光电部分产额谱的实验观察一致的^[6].

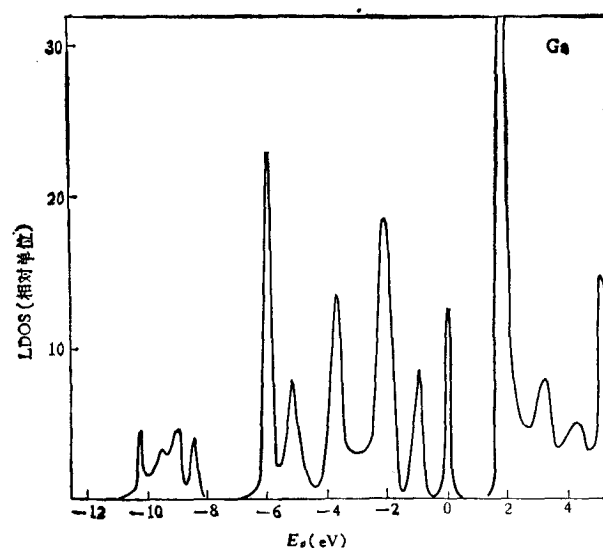


(a) Ga 原子的表面定域态密度

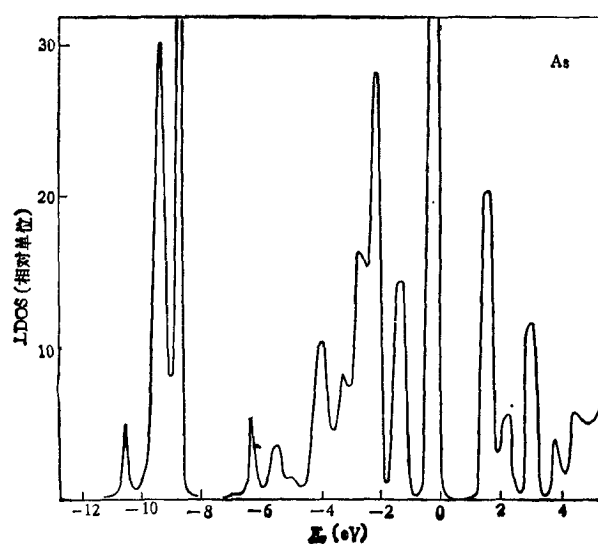


(b) As 原子的表面定域态密度

图 5 选用参数(一)和 18° 的弛豫模式以及 $N_0 = 5$ 的有饱和的 slab 模型



(a) Ga 原子的表面定域态密度



(b) As 原子的表面定域态密度

图 6 选用参数(二)和 26.4° 的弛豫模式以及 $N_0 = 5$ 的有饱和的 slab 模型

当选用第二组参数以及 26.4° 的弛豫模型, 对有饱和的 slab 模型所得的结果如图 6 所示. 计算结果与 Kann^[4] 以及 Chadi^[5] 的结果基本一致. 禁带中也不存在表面态. 目前从低能电子衍射所得的实验结果, 大多数作者认为弛豫角是 27° , 和这组参数结果比较一致.

工作过程中得到谢希德教授、张开明老师和陆栋老师的热忱指导, 特致谢意.

参 考 文 献

- [1] A. Kann *et al.*, *Surface Sci.*, **71**(1978), 387.
- [2] S. Y. Tong *et al.*, *Phys. Rev. B*, **15**(1978), 3303.
- [3] A. R. Lubinsky *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **36**(1976), 1058.
- [4] D. J. Chadi, *Phys. Rev. B*, **15**(1978), 1800.
- [5] D. J. Chadi, *Phys. Rev. B*, **19**(1979), 2074.
- [6] 张开明, 叶令, 物理学报, **29**(1980), 686.
- [7] K. C. Pandey *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**(1977), 904.
- [8] J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **91**(1954), 1498.
- [9] K. Hirabayashi, *J. Phys. Soc. Jap.*, **27**(1969), 1475.
- [10] J. D. Joannopoulos and Marvin L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **10**(1974), 5075.
- [11] Eugene, J. Mele and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev. B*, **17**(1978), 1816.
- [12] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. State. Sol. (B)*, **68**(1975), 405.

TIGHT-BINDING CALCULATION FOR GaAs (110) SURFACE

XU YONG-NIAN

(Department of Physics, Fudan University)

ABSTRACT

In the present work, the tight-binding calculation for the rotational relaxed GaAs (110) surface is studied. In order to simulate the semi-infinite crystal, a saturating slab model is adopted with the last layer of which being saturated by some quasi As and Ga atoms, so that the slab model can be considered as having one surface only. The LDOS thus obtained agrees well with that given by the conventional slab model.