

层状超薄共格结构 (LUCS) 电子态的紧束缚计算^{1) 2)}

熊 诗 杰 蔡 建 华

(南京大学固体物理研究所)

1981 年 7 月 13 日收到

提 要

本文就一种简单的模型,在紧束缚近似下,只计及最近邻之间的矩阵元,用格林函数方法计算了新近出现的人工材料——层状超薄共格结构——电子能带的亚结构,和投影于各层原子平面的电子局域态密度。在附录中,我们表述了用丸盒轨道 (MTO) 和界面平面波轨道 (IPWO) 的线性组合,更精密地计算电子结构的方法。

一、引 言

由于气相沉积、溅射和分子束外延等技术的进展,新近出现了层状超薄共格结构 (以下简称 LUCS) 的人工材料^[1]。已经能够做到将两种有不同的晶体结构和差别很大的晶格常数的成份 (如 Nb 为 bcc 和 Cu 为 fcc, 晶格常数相差 10%) 交替结合成层状的结构,每一层薄到只含有几个原子平面 (厚度 $\sim 10 \text{ \AA}$)。X 射线衍射和电子显微镜的观察表明这种人工材料具有在微观尺度上的分层结构,存在清晰的界面,相邻层之间不同成份的混杂达到了最小的程度^[1,2]。

在这类新型人工合成的材料中,可能出现新的物理现象和效应。已经发现 Nb/Cu LUCS 表现出特殊的超导临界温度与层厚的关系^[2]。理论工作曾经指出在层状超薄材料中出现激子超导电性^[3] 和新的磁性相的可能性。LUCS 材料也可能有各种吸引人的实际应用的潜力,例如可用作中子和 X 射线的单色器及极化中子镜 (波长范围 5—100 $\text{\AA}$)。显然更多的和更重要的应用尚有待于发掘。在这类材料中,因存在一个方向的超晶格和许多界面而造成的电子结构和声子谱的变化,以及它们对于物理性质的影响,是使人感兴趣的。这方面的理论和实验的研究最终可能导致,按照预定的目的人工地制造具有特殊功能的材料和器件。

本文的主要部份是对于简化的模型性 LUCS 进行紧束缚近似的计算。

图 1 表示我们将对它进行计算的模型。由 l_a 个原子平面组成的 A 种金属和 l_b 个原子平面组成的 B 种金属交替结合组成 LUCS。为了计算的简便起见,假定 A, B 都是晶格

1) 本文是熊诗杰学位论文的一部份。

2) 本文一部份内容的摘要已为第十六届国际低温物理会议接受。

参数相同的简立方结构, 界面平行于(100)晶面. 我们采用紧束缚近似, 并且只考虑最近邻之间原子势的矩阵元.

二、电子能谱的计算

我们的计算采用了文献[4]和[5]研究表面和界面电子态所用的格林函数技术. 为了我们的目的, 需要进行下列两个步骤的计算: 1) 从大块的 A(B) 晶体, 在平行于(100)晶面的 $n = 0$ 和 $n = l_a(l_b)$ 及 $n = l_a(l_b)$ 和 $n = l_a + 1(l_b + 1)$ 原子平面间切开, 得到由 $l_a(l_b)$ 层原子平面构成的 A(B) 金属的薄膜; 2) 把无数 A 和 B 金属薄膜交替叠合起来, 并引入 A, B 薄膜间的界面耦合势, 而形成 LUCS 以下, 依次叙述两个步骤的计算.

1) 省略下标 a 和 b . 切开 $n = 0$ 和 $n = l$ 平面及 $n = l$ 和 $n = l + 1$, 破坏了垂直于(100)晶面的 z 方向的周期性, 因此需要如文献[4]那样采取在 z 方向上的 Wannier 表象和垂直于 z 轴平面上的 Bloch 表象. 定义单电子格林算符如下:

$$(E - i0^+ - \hat{H})\hat{G} = 1, \quad (1)$$

式中 $\hat{H}$ 是电子的哈密顿算符. 在上述混合的 Bloch-Wannier 表象中, 大块金属中电子的哈密顿 $\hat{H}_B$ 的矩阵元是

$$\begin{aligned} H_B(n, n, \mathbf{k}_{\parallel}) &= W(\mathbf{k}_{\parallel}), \\ H_B(n, n \pm 1, \mathbf{k}_{\parallel}) &= T(\mathbf{k}_{\parallel}) \exp[\pm i\theta(\mathbf{k}_{\parallel})], \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\mathbf{k}_{\parallel}$ 是 x - y 平面上的 Bloch 波矢, n 是沿 z 方向的原子平面的编号. 相对于量子数 $\mathbf{k}_{\parallel}$, $\hat{H}_B$ 是对角化的, 并且我们只考虑相邻原子平面间的矩阵元. 按(1)式, 大块金属的电子格林函数为^[4]

$$G_B(n) = i(4T^2 - \omega^2)^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{\omega + i(4T^2 - \omega^2)^{\frac{1}{2}}}{2T} \right]^{|n|} \exp(-in\theta). \quad (3)$$

此处

$$\begin{aligned} \omega &= E - W(\mathbf{k}_{\parallel}), \\ \mu &= (4T^2 - \omega^2)^{\frac{1}{2}} = \begin{cases} \sqrt{4T^2 - \omega^2} & 4T^2 > \omega^2, \\ i \operatorname{sgn}(\omega) \sqrt{\omega^2 - 4T^2} & 4T^2 < \omega^2. \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

引入有下列矩阵元的微扰势 $\hat{V}'$, 使 $n = 0$ 与 $n = 1$ 及 $n = l$ 与 $n = l + 1$ 原子平面分离:

$$V'(0, 1) = -Te^{i\theta}, \quad V'(l+1, l) = -Te^{-i\theta}, \quad V'(1, 1) = V'(l, l) = U. \quad (5)$$

于是由 Dyson 方程

$$\hat{G}_F = \hat{G}_B + \hat{G}_B \hat{V}' \hat{G}_F. \quad (6)$$

可以解出除去了 $n \leq 0$ 和 $n > l$ 的诸原子平面后的薄膜的电子格林算符 $\hat{G}_F$ ^[4]. 为了后面的应用, 我们只需要写出 $\hat{G}_F$ 的下列元素:

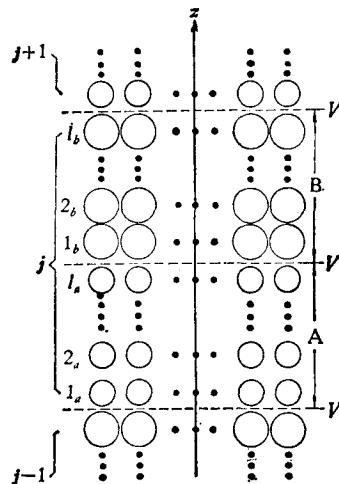


图1 作紧束缚计算用的简单 LUCS 模型图中标明原子平面的编号

$$\begin{aligned}
G_F(\mathbf{k}_{\parallel}; 1, n) &= \Delta_F^{-1} e^{i(n-1)\theta} [T(A^{l-n+1} - A^{-l+n-1}) + U(A^{n-l} - A^{l-n})], \\
G_F(\mathbf{k}_{\parallel}; l, n) &= \Delta_F^{-1} e^{i(n-l)\theta} [T(A^n - A^{-n}) + U(A^{-n+1} - A^{n-1})], \\
G_F(\mathbf{k}_{\parallel}; n, n) &= i(\Delta_F \mu)^{-1} [T^2(A^{l-2n+1} + A^{-l+2n-1} - A^{l+1} - A^{-l-1}) \\
&\quad + U^2(A^{l-2n+1} + A^{-l+2n-1} - A^{l-1} - A^{-l+1}) \\
&\quad + TU(2A^l + 2A^{-l} - A^{l-2n+2} - A^{-l+2n-2} \\
&\quad - A^{l-2n} - A^{-l+2n})].
\end{aligned} \tag{7}$$

以上

$$\begin{aligned}
A &= (\omega - i\mu)/2T, \\
\Delta_F &= A^{l-1}(TA - U)^2 - A^{-l+1}(TA^{-1} - U)^2.
\end{aligned} \tag{8}$$

当 $4T^2 > \omega^2$ 时, A 是复数, 而 $A^{-1} = A^*$. 注意到这一点, 对于固定的 $\mathbf{k}_{\parallel}$, 容易由(7)式的第三式看出, 薄膜只有 l 个分立的能级, 它们由 $\Delta_F = 0$ 的根给出.

2) 现在把无数层 A 和 B 膜交替地堆积起来, 并且在各层膜之间引入耦合势 $\hat{V}$, 把它们胶合在一起成为 LUCS. $\hat{V}$ 将只有界面两侧相邻的分属 A 和 B 膜的原子平面间的矩阵元 $te^{i\varphi}$ (图 1). 对应于 $V'(1, 1) = V'(l, l) = U$ [(5)式] 的 $\hat{V}$ 的矩阵元可以不计. 这些矩阵元代表不同的膜相耦合所造成的对于膜表面原子层自洽势的修正. 这种修正可以和因为从大块金属中切出薄膜而引入的自洽势修正 U 合并在一起, 毋需单独考虑^[5].

这里必须注意到一点: 堆积的结果, 恢复了 z 方向的周期性, 空间的新周期是

$$D = (l_a + l_b)d,$$

d 是晶格常数 (图 1), 在 z 方向的一个“超原胞”包含相邻的一片 A 膜和一片 B 膜. 于是 z 方向的 Bloch 波矢 k_z 重新成为好量子数. 新的 Bloch 态为

$$|\mathbf{k}_{\parallel}, k_z; \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp(ik_z z_j, \alpha) |\mathbf{k}_{\parallel}; j, \alpha\rangle, \tag{9}$$

其中 $j = 1, \dots, N$ 是“超原胞”的标号, $\alpha = 1_a, \dots, l_a, 1_b, \dots, l_b$ 是一个超原胞内原子平面的标号, 而 $z_{j,\alpha}$ 是第 j 个超原胞内第 α 个原子平面的 z 坐标. 采用以(9)式为基的表象, 问题就简化成使 $(l_a + l_b) \times (l_a + l_b)$ 的矩阵对角化的工作. 分别记无耦合的多层交叠薄膜的格林算符、耦合势及 LUCS 的格林算符为 $\hat{G}_0$, $\hat{V}$ 及 $\hat{G}$, 则对于量子数 $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$, 它们都只有对角矩阵元:

$$\langle \mathbf{k}, \alpha | \hat{O} | \mathbf{k}', \beta \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle \mathbf{k}, \alpha | \hat{O} | \mathbf{k}, \beta \rangle, \quad \hat{O} = \hat{G}_0, \hat{V} \text{ 或 } \hat{G}. \tag{10}$$

按(9)式,

$$\langle \mathbf{k}, \alpha | \hat{G}_0 | \mathbf{k}, \beta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \mathbf{k}_{\parallel}; i, \alpha | \hat{G}_0 | \mathbf{k}_{\parallel}; j, \beta \rangle \exp[ik_z(z_{j\beta} - z_{ia})].$$

显然,

$$\langle \mathbf{k}_{\parallel}; i, \alpha | \hat{G}_0 | \mathbf{k}_{\parallel}; j, \beta \rangle = \delta_{ij} \begin{cases} G_F^a(\mathbf{k}_{\parallel}; \alpha, \beta) & 1_a \leq \alpha, \beta \leq l_a, \\ G_F^b(\mathbf{k}_{\parallel}; \alpha, \beta) & 1_b \leq \alpha, \beta \leq l_b. \end{cases}$$

因此

$$\langle \mathbf{k}, \alpha | \hat{G} | \mathbf{k}, \beta \rangle = e^{ik_z d(\beta - \alpha)} \begin{cases} G_F^a(\mathbf{k}_{\parallel}; \alpha, \beta) & 1_a \leq \alpha, \beta \leq l_a, \\ G_F^b(\mathbf{k}_{\parallel}; \alpha, \beta) & 1_b \leq \alpha, \beta \leq l_b. \end{cases} \tag{11}$$

以上 G_F 由(7)式给出, 上标 a 和 b 分别标明是 A 金属薄膜和 B 金属薄膜的格林函数, 在

写出相应的具体表式时, 对其中各量应分别加下标 a 或 b . 分别的 A 和 B 金属原来的费密能一般不相等, 在发生耦合后, 电子流动, 使费密能拉平, 同时在界面上产生电偶极层, 使两侧的费密能分别改变 ν_a 和 ν_b , 则代替 ω [(4)式], 在计算 G_F^a 和 G_F^b 时, 应分别用

$$\begin{aligned}\omega_a &= E - W_a(\mathbf{k}_{\parallel}) + \nu_a, \\ \omega_b &= E - W_b(\mathbf{k}_{\parallel}) + \nu_b.\end{aligned}\quad (12)$$

其次, 关于耦合势, 有

$$\begin{aligned}\langle i, \alpha | \hat{V} | j, \beta \rangle &= t e^{i\varphi} (\delta_{i, j-1} \delta_{a, l_b} \delta_{\beta, l_a} + \delta_{ij} \delta_{a, l_b} \delta_{\beta, l_a}) \\ &\quad + t e^{-i\varphi} (\delta_{i, j+1} \delta_{a, l_a} \delta_{\beta, l_b} + \delta_{ij} \delta_{a, l_a} \delta_{\beta, l_b}).\end{aligned}$$

因此, 在以(9)式为基的表象中,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}, \alpha | \hat{V} | \mathbf{k}, \beta \rangle &= t (e^{ik_z d + i\varphi} \delta_{a, l_b} \delta_{\beta, l_a} + e^{-ik_z d + i\varphi} \delta_{a, l_b} \delta_{\beta, l_a} \\ &\quad + e^{-ik_z d - i\varphi} \delta_{a, l_a} \delta_{\beta, l_b} + e^{ik_z d - i\varphi} \delta_{a, l_a} \delta_{\beta, l_b}).\end{aligned}\quad (13)$$

用(11)和(13)式, 代入 Dyson 方程

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}, \quad (14)$$

即可解出 $\hat{G}$. 用矩阵元写出, (14)式为

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}, \alpha | G | \mathbf{k}, \beta \rangle &= \langle \mathbf{k}, \alpha | G_0 | \mathbf{k}, \beta \rangle + t e^{ik_z d + i\varphi} \langle \mathbf{k}, \alpha | G_0 | \mathbf{k}, l_b \rangle \langle \mathbf{k}, l_a | G | \mathbf{k}, \beta \rangle \\ &\quad + t e^{-ik_z d + i\varphi} \langle \mathbf{k}, \alpha | G_0 | \mathbf{k}, l_b \rangle \langle \mathbf{k}, l_a | G | \mathbf{k}, \beta \rangle \\ &\quad + t e^{-ik_z d - i\varphi} \langle \mathbf{k}, \alpha | G_0 | \mathbf{k}, l_a \rangle \langle \mathbf{k}, l_b | G | \mathbf{k}, \beta \rangle \\ &\quad + t e^{ik_z d - i\varphi} \langle \mathbf{k}, \alpha | G_0 | \mathbf{k}, l_a \rangle \langle \mathbf{k}, l_b | G | \mathbf{k}, \beta \rangle.\end{aligned}$$

由此解得我们需要的 $\hat{G}$ 的对角元如下:

$$\langle \mathbf{k}, \alpha | G^{a(b)} | \mathbf{k}, \alpha \rangle = G_F^{a(b)}(\mathbf{k}_{\parallel}; \alpha, \alpha) + \Delta^{-1} [P_{a(b)} \cos(k_z D) + Q_{a(b)}]. \quad (15)$$

上标(下标)为 a 或 b , 视 $l_a \leq \alpha \leq l_a$ 或 $l_b \leq \alpha \leq l_b$ 而定. 式中

$$\begin{aligned}P_a &= 2t^2 \Delta_{Fb} [T_a(A_a^{l_a - \alpha + 1} - A_a^{-l_a + \alpha - 1}) + U_a(A_a^{-l_a + \alpha} - A_a^{l_a - \alpha})] [T_a(A_a^{\alpha} - A_a^{-\alpha}) \\ &\quad + U_a(A_a^{-\alpha + 1} - A_a^{\alpha - 1})] T_b(A_b - A_b^{-1}),\end{aligned}\quad (16)$$

$$\begin{aligned}Q_a &= t^2 \Delta_{Fb} [T_b(A_b^{l_b} - A_b^{-l_b}) + U_b(A_b^{-l_b + 1} - A_b^{l_b - 1})] \{ [T_a(A_a^{l_a - \alpha + 1} - A_a^{-l_a + \alpha - 1}) \\ &\quad + U_a(A_a^{-l_a + \alpha} - A_a^{l_a - \alpha})]^2 + [T_a(A_a^{\alpha} - A_a^{-\alpha}) + U_a(A_a^{-\alpha + 1} - A_a^{\alpha - 1})]^2 \} \\ &\quad + t^4 \Delta_{Fb} (A_b^{-l_b + 1} - A_b^{l_b - 1}) \{ T_a(A_a^{2l_a - 2\alpha + 1} + A_a^{-2l_a + 2\alpha - 1} + A_a^{2\alpha - 1} \\ &\quad + A_a^{-2\alpha + 1} - 2A_a - 2A_a^{-1}) + U_a[4 - (A_a^{-l_a + 2\alpha - 1} \\ &\quad + A_a^{l_a - 2\alpha + 1})(A_a^{l_a - 1} + A_a^{-l_a + 1})] \}.\end{aligned}\quad (17)$$

在上两式右方互换下标 a 和 b , 即得 P_b 和 Q_b ;

$$\begin{aligned}\Delta &= \Delta_{Fa} \Delta_{Fb} \{ \Delta_{Fa} \Delta_{Fb} - 2t^2 [T_a(A_a^{l_a} - A_a^{-l_a}) + U_a(A_a^{-l_a + 1} - A_a^{l_a - 1})] [T_b(A_b^{l_b} - A_b^{-l_b}) \\ &\quad + U_b(A_b^{-l_b + 1} - A_b^{l_b - 1})] + t^4 (A_a^{l_a - 1} - A_a^{-l_a + 1})(A_b^{l_b - 1} - A_b^{-l_b + 1}) \} \\ &\quad - 2t^2 \Delta_{Fa} \Delta_{Fb} T_a T_b (A_a - A_a^{-1})(A_b - A_b^{-1}) \cos(k_z D) \equiv f + g \cos(k_z D).\end{aligned}\quad (18)$$

(15)式分母的零点, 即 $\Delta = 0$ 的根, 给出 LUCS 的电子能谱. 对于固定的 k_z , $\Delta = 0$ 有 $l_a + l_b$ 个根. 因 $-\pi \leq k_z D \leq \pi$, 每一个根扩展成一个亚能带.

将 $\langle \mathbf{k}, \alpha | G | \mathbf{k}, \alpha \rangle$ 对 k_z 求平均

$$\bar{G}^{a(b)}(\mathbf{k}_{\parallel}, \alpha) = \frac{1}{N} \sum_{k_z} \langle \mathbf{k}, \alpha | G^{a(b)} | \mathbf{k}, \alpha \rangle$$

$$= \begin{cases} i \frac{fP_{a(b)} + gQ_{a(b)}}{g\sqrt{g^2 - f^2}} \operatorname{sgn} \left[\frac{d}{dE} \left(\frac{f}{g} \right) \right] & \left(\frac{f}{g} \right)^2 < 1, \\ \frac{fP_{a(b)} + gQ_{a(b)}}{g\sqrt{f^2 - g^2}} \operatorname{sgn} \left[\frac{d}{dE} \left(\frac{f}{g} \right) \right] & \left(\frac{f}{g} \right)^2 > 1. \end{cases} \quad (19)$$

由此可得局域态密度,

$$\begin{aligned} \rho^{a(b)}(\alpha) &= (\pi N_{\parallel})^{-1} \sum_{k_{\parallel}} \operatorname{Im} \bar{G}^{a(b)}(k_{\parallel}, \alpha) \\ &= \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2 \cdot \pi} \frac{fP_{a(b)} + gQ_{a(b)}}{g\sqrt{g^2 - f^2}} \operatorname{sgn} \left[\frac{d}{dE} \left(\frac{f}{g} \right) \right] \theta \left(1 - \frac{f^2}{g^2} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

其中 $\kappa \equiv k_{\parallel}d$. 总的态密度为

$$\rho = \frac{1}{l_a + l_b} \left[\sum_{a=1}^{l_a} \rho^a(\alpha) + \sum_{a=1}^{l_b} \rho^b(\alpha) \right]. \quad (21)$$

三、数值结果和讨论

对于简立方晶体,(2)式中的

$$W(k_{\parallel}) = 2T(\cos \kappa_x + \cos \kappa_y).$$

按(18),和(20)式进行数值计算. 图2是在 $l_a = l_b = 4$, $U_a = U_b = 0$, $T_a = T_b = t = 0.5$ 情形,当 $\kappa_x = \kappa_y = 0$ 时, $E \sim \kappa_z \equiv k_z D$ 的色散曲线,表示出亚带结构. $-\pi \leq \kappa_z \leq 0$ 的部份与图中所示的部份相对称. 图3至图5是在各图中所说明的参数值情形的局域态密度(LDOS)曲线.

本文说明的 LUCS 能带计算技术的好处是简单易行. 如图2至图5的结果,甚至于用计算器即可算出. 为了简便起见,更主要地是为了说明方法,我们只就两种金属都是

相同晶格常数的简立方情形作了计算. 同样的技术很容易推广应用于计算更切合实际的 LUCS 的模型. 这样的计算正在进行中. 由于这种计算是在紧束缚近似,并且在只计入最近邻间矩阵元的条件下进行的,它的结果所表达的电子结构的精确性受到很大的限制. 要获得精确的结果必须作复杂得多的计算. 在附录中表述了一种更精确的 LUCS 能带计算方法.

也可以用本文的技术研究金属-半导体 LUCS, 或超导-正常 LUCS 系统. 前者对于更加仔细地探讨激子超导的 ABB 模型是有意义的.

LUCS 的最重要的特点是许多界面所起的影响. 它们不仅如本文所描述的那样,使电子结构发生重大的变化,并且也影响声子

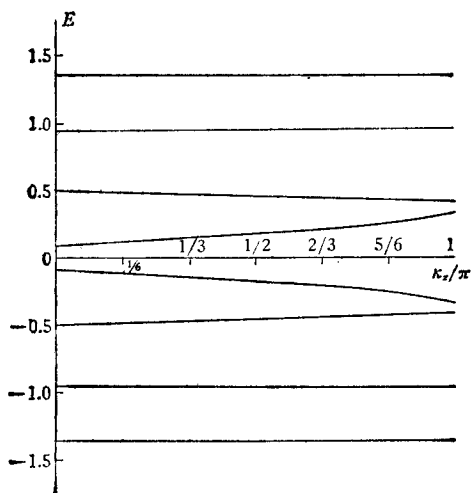


图2 $4 + 4$ LUCS 的亚带结构
 $-\pi \leq \kappa_z \leq 0$ 部分的色散曲线与 $0 \leq \kappa_z \leq \pi$ 的部分相对称,因此未画出

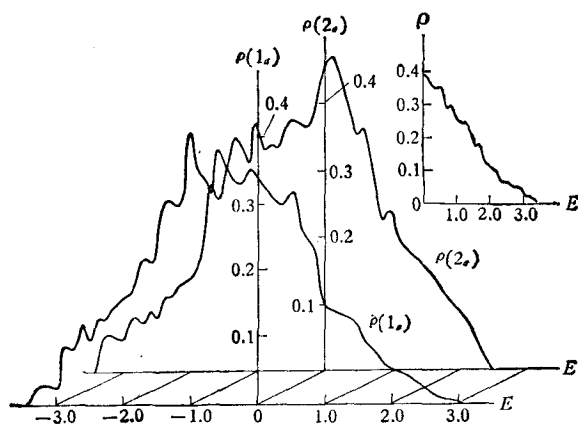


图3 4+4LUCS 的 LDOS 参数为 $U_a = U_b = 0$, $T_a = T_b = t = 0.5$, $v_a = -v_b = 0.5$; 在此情形 $\rho(1_b) = \rho(1_a)$, $\rho(2_b) = \rho(2_a)$, $\rho(4_a, E) = \rho(4_b, E) = \rho(1_a, -E)$, $\rho(3_a, E) = \rho(3_b, E) = \rho(2_a, -E)$; 右上角的插图给出 $\rho(E) = \frac{1}{2} [\rho(1_a) + \rho(2_a)]$ 的曲线, 它对于 $\pm E$ 为对称

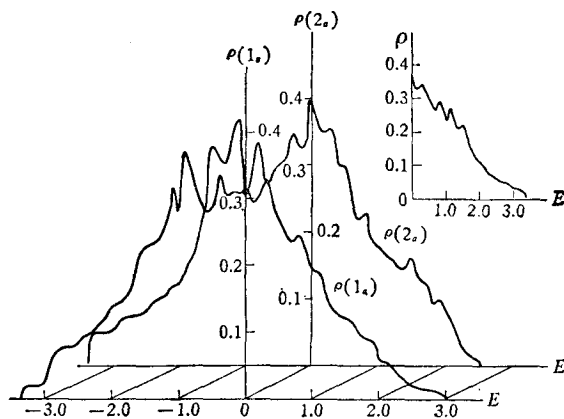


图4 同图3, 但参数为 $U_a = 0.1, U_b = -0.1$, $T_a = T_b = t = 0.5$, $v_a = -v_b = 0.5$

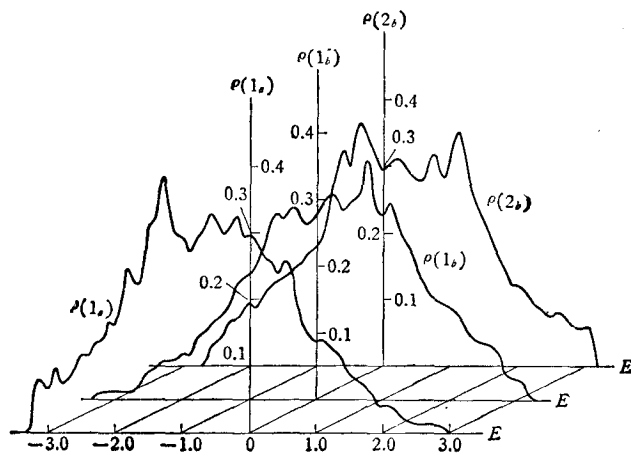


图5 2+4 LUCS 的 LDOS 参数为 $U_a = U_b = 0$, $T_a = T_b = t = 0.5$, $v_a = 0.6$, $v_b = -0.3$, $\rho(2_a, E) = \rho(1_a, -E)$, $\rho(4_b, E) = \rho(1_b, -E)$, $\rho(3_b, E) = \rho(2_b, -E)$

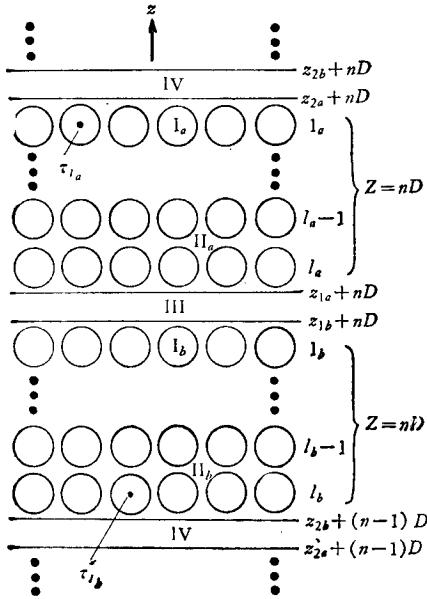
谱. 全面地研究 LUCS 的特性, 例如它的超导性质, 必须对于电子结构、声子谱以及电子-声子相互作用, 作详细的计算. 如文献[2]所报道的超导临界温度与层厚的异常关系的实验结果, 必须归结于界面所起的作用, 如文献[6]的末尾所说, 决非一般的邻近效应所能解释. 总之, 有关 LUCS 的理论工作将是固体理论的一个相当大的课题.

作者感谢 Drs. Schuller 和 Falco 惠寄他们工作的预印本.

附 录

此处表述一种用丸盒轨道^[7]和界面平面波轨道^[8]的线性组合计算 LUCS 的电子能带结构的方法. 如附录图 1, 仍假定 A 和 B 薄层有相同的点阵结构和参数(对于一般的情形并不难加以推广). 我们写单电子势如下:

$$V(r) = \begin{cases} V_0(z - z_{1b} - nD) & z_{1a} + nD > z > z_{1b} + nD, \\ V_0(z_{2b} + nD - z) & z_{2b} + nD > z > z_{2a} + nD, \\ V_a(|r - R_n - \tau_{a\alpha}|) & |r - R_n - \tau_{a\alpha}| \leq s, \\ V_{aMT} & z_{2a} + nD > z > z_{1a} + nD, |r - R_n - \tau_{a\alpha}| > s, \\ V_b(|r - R_n - \tau_{b\alpha}|) & |r - R_n - \tau_{b\alpha}| \leq s, \\ V_{bMT} & z_{1b} + nD > z > z_{2b} + (n-1)D, |r - R_n - \tau_{b\alpha}| > s. \end{cases} \quad (A.1)$$



附录图 1 表述 MTO + IPWO 用的简单 LUCS 模型

图中标明 6 类区域 I_a, I_b, II_a, II_b, III 和 IV

这里 s 是原子球的半径, R_n 为超晶格矢, 而 $\tau_{a\alpha}$ 及 $\tau_{b\alpha}$ 分别是一个超原胞中第 i 个原子平面中原子球中心相对原胞起点的位矢, $\alpha = 1_a, \dots, l_a$ 或 $\alpha = 1_b, \dots, l_b$. 势 V_0 的存在是界面两侧电偶极层造成的; V_{aMT} 和 V_{bMT} 则是常数势. 上式中第一行是在附录图 1 的区域 III 中的势, 第二行指在区域 IV 中, 以下依次指在区域 I_a, II_a, I_b 及 II_b 中.

引入下列丸盒轨道 (MTO)^[7]

$$\begin{aligned} \chi_{La(b)}(E, \kappa_{a(b)}, r) \\ = iY_L(r) \begin{cases} u_l^{(b)}(r) + (c_l^{(b)} - is_l^{(b)}\kappa_{a(b)}^2 l_l^{(1)}) J_l(\kappa_{a(b)} r) & |r| < s; \\ -s_l^{(b)} K_l(\kappa_{a(b)} r), & |r| > s. \end{cases} \end{aligned} \quad (A.2)$$

这里 $Y_L(r)$ 是球谐函数, $L \equiv (l, m)$, $u_l^{(b)}$ 为相应的径向 Schrödinger 方程的解, 而

$$J_l(\kappa r) \equiv \kappa^{-l} j_l(\kappa r), \quad K_l(\kappa r) \equiv \kappa^{l+1} h_l^{(1)}(\kappa r). \quad (A.3)$$

j_l 和 $h_l^{(1)}$ 是球 Bessel 函数和第一类球 Hankel 函数, 又

$$\begin{aligned} \kappa_{a(b)} &= (E - V_{a(b)MT})^{1/2}, \quad E > V_{a(b)MT}; \\ i(V_{a(b)MT} - E)^{1/2}, & \quad E < V_{a(b)MT} \end{aligned} \quad (A.4)$$

(A.2) 式对于一切能量 E 都是可归一化的. 系数 $c_l^{(b)}$ 和 $s_l^{(b)}$ 由在球面 $|r| = s$ 上的连续性条件决定. 相似于 (A.2) 式, 引入下列区域 III 和 IV 中的界面平面波轨道 (IPWO)^[8]

$$\chi_{m1}(E, r)$$

$$= e^{ik_m r} \begin{cases} c_m^a e^{iQ_m^a(z-z_{1b})} + s_m^b e^{iQ_m^b(z-z_{1b})} & z > z_{1a}, \\ u_m(E, z-z_{1b}) + s_m^a e^{-iQ_m^a(z-z_{1b})} \\ + s_m^b e^{iQ_m^b(z-z_{1b})} & z_{1a} > z > z_{1b}, \\ c_m^b e^{-iQ_m^b(z-z_{1b})} + s_m^a e^{-iQ_m^a(z-z_{1b})} & z < z_{1b}; \end{cases}$$

$$\chi_{m2}(E, r) = e^{ik_m r} \begin{cases} c_m^b e^{-iQ_m^b(z_{2b}-z)} + s_m^a e^{-iQ_m^a(z_{2b}-z)} & z > z_{2b}, \\ u_m(E, z_{2b}-z) + s_m^a e^{-iQ_m^a(z_{2b}-z)} + s_m^b e^{iQ_m^b(z_{2b}-z)} & z_{2b} > z > z_{2a}, \\ c_m^a e^{iQ_m^a(z_{2b}-z)} + s_m^b e^{iQ_m^b(z_{2b}-z)} & z < z_{2a}. \end{cases} \quad (A.5)$$

这里 u_m 是下列方程(分别在 III, IV 区域中)的解:

$$\left[k_m^2 - \frac{d^2}{dz^2} + V_0(z) \right] u_m = E u_m, \quad k_m = k_\parallel + g_m$$

$$Q_m^{a(b)} = (\kappa_{a(b)}^2 - k_m^2)^{1/2}, \quad \kappa_{a(b)}^2 > k_m^2; \quad i(\kappa_m^2 - \kappa_{a(b)}^2)^{1/2}, \quad \kappa_{a(b)}^2 < k_m^2. \quad (\text{A.6})$$

g_m 是二维倒格矢. 系数 $c_m^{a(b)}$ 和 $s_m^{a(b)}$ 由 χ_m 的连续性条件决定. 在金属-金属 LUCS 情形, 界面电偶极层的厚度可以忽略, $z_{1a} - z_{1b} \rightarrow 0$, $z_{2a} - z_{2b} \rightarrow 0$, 此时

$$\chi_{m1}(E, r) = e^{ik_m r} \begin{cases} c_m^a e^{iQ_m^a(z-z_1)} + s_m^b e^{iQ_m^b(z-z_1)} & z > z_1, \\ c_m^b e^{-iQ_m^b(z-z_1)} + s_m^a e^{-iQ_m^a(z-z_1)} & z < z_1; \end{cases}$$

$$\chi_{m2}(E, r) = e^{ik_m r} \begin{cases} c_m^b e^{-iQ_m^b(z_2-z)} + s_m^a e^{-iQ_m^a(z_2-z)} & z > z_2, \\ c_m^a e^{iQ_m^a(z_2-z)} + s_m^b e^{iQ_m^b(z_2-z)} & z < z_2, \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

这时系数 $c_m^{a(b)}$ 和 $s_m^{a(b)}$ 满足下列关系:

$$c_m^a + s_m^b = c_m^b + s_m^a, \quad Q_m^a c_m^a + Q_m^b c_m^b = -Q_m^a s_m^a - Q_m^b s_m^b. \quad (\text{A.8})$$

电子波函数为 (A.2) 式 (MTO) 和 (A.7) 式 (IPWO) 的线性组合:

$$\psi_k(E, r) = \sum_{L,a} A_{La,a}(k) \sum_{R_n} e^{ik \cdot R_n} \chi_{La}(E, \kappa_a, r - R_n - r_{a0})$$

$$+ \sum_{L,a} A_{Lb,a}(k) \sum_{R_n} e^{ik \cdot R_n} \chi_{Lb}(E, \kappa_b, r - R_n - r_{b0})$$

$$+ \sum_{m, Z_n} e^{ik \cdot Z_n} [A_{m1} \chi_{m1}(E, r - Z_n \hat{z} - z_1 \hat{z}) + A_{m2} \chi_{m2}(E, r - Z_n \hat{z} - z_2 \hat{z})]. \quad (\text{A.9})$$

Z_n 为 R_n 的 z 分量, $\hat{z}$ 是 z 方向的单位矢.

在附图图 1 所示由原子球组成的区域 I_a 中, (A.9) 式右方第一个求和式中的某一项, 是 Schrödinger 方程的解. 因此, 在此区域内, 其余项应互相抵消. 另一方面, 含有 χ_{La} 和 χ_{m1} 及 χ_{m2} 中含有系数 $c_m^{a(b)}$ 的项构成在原子球外的区域 II_a 中的解, 在此区域中, 其余项也应抵消. 在区域 I_b 和 II_b 中也是类似. 由这些条件得到诸系数 A 及 $c_m^{a(b)}$, $s_m^{a(b)}$ 所满足的方程. 由这些方程(经过利用球 Bessel 函数的加法定理和展开公式^[9]化简之后)及 (A.8) 式, 可将 $A_{m1(z)}$, $c_m^{a(b)}$, $s_m^{a(b)}$ 消去, 从而得到 $A_{La(b),a}$ 的下列线性联立齐次方程组:

$$\sum_{L',a} A_{L'a,a}(k) [(c_1^a - is_1^a \kappa_a^{2l+1}) \delta_{La,L'a} \delta_{a\beta} + s_1^a D_{LaL'a}^{\alpha\beta}(\kappa_a, k) - s_1^a B_{LaL'a}^{\alpha\beta}(\kappa_a, k)$$

$$+ T_{LaLa}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) s_1^a \kappa_a^{l+l'}]$$

$$+ \sum_{L'b,a} A_{L'b,a}(k) s_1^a \kappa_a^{l'} \kappa_b^l T_{LaLa}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) = 0 \quad \kappa_a^2 > 0;$$

$$\sum_{L',a} A_{L'a,a}(k) [(c_1^a - is_1^a \kappa_a^{2l+1}) \delta_{La,L'a} \delta_{a\beta} - s_1^a B_{LaL'a}^{\alpha\beta}(\kappa_a, k)$$

$$+ T_{LaLa}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) s_1^a \kappa_a^{l+l'}]$$

$$+ \sum_{L'b,a} A_{L'b,a}(k) s_1^a \kappa_a^{l'} \kappa_b^l T_{LaLa}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) = 0 \quad \kappa_a^2 < 0;$$

$$\sum_{L'b,a} A_{L'b,a}(k) [(c_1^b - is_1^b \kappa_b^{2l+1}) \delta_{Lb,L'b} \delta_{a\beta} + s_1^b D_{LbL'b}^{\alpha\beta}(\kappa_b, k) - s_1^b B_{LbL'b}^{\alpha\beta}(\kappa_b, k)$$

$$+ T_{LbLb}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) s_1^b \kappa_b^{l+l'}]$$

$$+ \sum_{L'a,a} A_{L'a,a}(k) s_1^a \kappa_a^{l'} \kappa_b^l T_{LbLb}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) = 0 \quad \kappa_b^2 > 0;$$

$$\sum_{L'b,a} A_{L'b,a}(k) [(c_1^b - is_1^b \kappa_b^{2l+1}) \delta_{Lb,L'b} \delta_{a\beta} - s_1^b B_{LbL'b}^{\alpha\beta}(\kappa_b, k)$$

$$+ T_{LbLb}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, k) s_1^b \kappa_b^{l+l'}]$$

$$+ \sum_{L_a, a} A_{L_a, a}(\mathbf{k}) i^a \kappa_a^L \kappa_b^{L'} T_{LbLa}^{\alpha\beta}(\kappa_a, \kappa_b, \mathbf{k}) = 0 \quad \kappa_b^2 < 0. \quad (\text{A. 10})$$

以上

$$B_{L'L}^{\alpha\beta}(\kappa, \mathbf{k}) = 4\pi \sum_{R_n + \tau_a \mp \tau_\beta} \sum_{L''} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} C_{LL'L''} \kappa^{L+L'-L''} K_{L''}^A(\kappa, \mathbf{R}_n + \tau_a - \tau_\beta),$$

$$D_{L'L}^{\alpha\beta}(\kappa, \mathbf{k}) = -4\pi i \kappa^{2L+1} \sum_{R_n, L''} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} C_{LL'L''} \kappa^{-L+L'-L''} J_{L''}^A(\kappa, \mathbf{R}_n + \tau_a - \tau_\beta). \quad (\text{A. 11})$$

这里 $C_{LL'L''}$ 是 Gaunt 系数, 而

$$K_L^A(\kappa, \mathbf{r} - \mathbf{R}) \equiv i^L Y_L(\mathbf{r}) \kappa^{L+1} \begin{cases} i h_L^{(1)}(\kappa r) & \kappa^2 > 0, \\ -n_L(\kappa r) & \kappa^2 < 0. \end{cases} \quad (\text{A. 12})$$

n_L 是球 Neumann 函数。在 (A. 10) 式中, 我们选择原点的位置使 $z_2 - D = 0$ 。

(A. 10) 式中的矩阵元 T 如下:

$$T_{LaLa}^{\alpha\beta} = 8\pi^2 i A^{-1} \sum_m (D_m Q_m^a)^{-1} \{ F_{1am\beta} Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) [Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) a_m^- e^{iQ_m^a \tau_{aa}} \\ + Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) a_m^+ e^{-iQ_m^a \tau_{aa}}] \\ + F_{2am\beta} Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) [Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) a_m^+ e^{iQ_m^a \tau_{aa}} \\ + Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) a_m^+ e^{-iQ_m^a \tau_{aa}}] \}, \quad (\text{A. 13})$$

式中 A 是在 x - y 平面上 LUCS 的总面积, 而

$$D_m = -8Q_m^a Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} - 2(Q_m^a - Q_m^b)^2 (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \cos[(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - Q_m^a D] \\ + 2\cos[(Q_m^b - Q_m^a)z_1 + Q_m^a D],$$

$$F_{1a(b)m\beta} = \sum_{Z_n > 0} \exp[ik_z Z_n + iQ_m^{a(b)} Z_n - iQ_m^{a(b)} \cdot \tau_{a(b)\beta}],$$

$$F_{2a(b)m\beta} = \sum_{Z_n < 0} \exp[ik_z Z_n - iQ_m^{a(b)} Z_n + iQ_m^{a(b)} \cdot \tau_{a(b)\beta}]. \quad (\text{A. 14})$$

$$a_m^- = \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] + \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] \\ - 4Q_m^a Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} (1 + e^{-iQ_m^a D}) \\ - (Q_m^a - Q_m^b)^2 (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] + \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \},$$

$$a_m^+ = (Q_m^a - Q_m^b)(Q_m^a + Q_m^b)^{-1} (e^{iQ_m^a D} - 1) \{ \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] - \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \},$$

$$a_m^{+-} = (Q_m^a - Q_m^b)(Q_m^a + Q_m^b)^{-1} (e^{-iQ_m^a D} - 1) \{ \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] - \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \},$$

$$a_m^{++} = \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 + iQ_m^a D] + \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] \\ - 4Q_m^a Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} (1 + e^{iQ_m^a D}) \\ - (Q_m^a - Q_m^b)^2 (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 + iQ_m^a D] \\ + \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \}. \quad (\text{A. 15})$$

$$T_{LaLb}^{\alpha\beta} = 8\pi i A^{-1} \sum_m (D_m Q_m^b)^{-1} \{ F_{1am\beta} Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) [Y_{Lb}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) b_m^- e^{iQ_m^b \tau_{ba}} \\ + Y_{Lb}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) b_m^+ e^{-iQ_m^b \tau_{ba}}] \\ + F_{2am\beta} Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) [Y_{Lb}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) b_m^+ e^{iQ_m^b \tau_{ba}} \\ + Y_{Lb}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) b_m^+ e^{-iQ_m^b \tau_{ba}}] \}. \quad (\text{A. 16})$$

$$b_m^- = 2Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] - \exp[iQ_m^a (2z_1 - D)] \\ - \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] + 1 \},$$

$$b_m^+ = 2Q_m^b (Q_m^a - Q_m^b)(Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp(iQ_m^a D) - \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \\ + \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] - 1 \},$$

$$b_m^{+-} = 2Q_m^b (Q_m^a - Q_m^b)(Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp(-iQ_m^a D) - \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \\ + \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 + iQ_m^a D] - 1 \},$$

$$b_m^{++} = 2Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ -\exp(-iQ_m^a D) + \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] \\ - \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] + 1 \}. \quad (\text{A. 17})$$

$$\begin{aligned}
T_{Lb',La}^{\alpha\beta} = & 8\pi^2 i A^{-1} \sum_m (D_m Q_m^a)^{-1} \{ F_{1bm\beta} Y_{Lb'}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) [Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) c_m^- e^{iQ_m^a \tau_{aa}} \\
& + Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) c_m^+ e^{-iQ_m^a \tau_{aa}}] \\
& + F_{2bm\beta} Y_{Lb'}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) [Y_{La}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^a) c_m^+ e^{iQ_m^a \tau_{aa}} \\
& + Y_{La}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^a) c_m^+ e^{-iQ_m^a \tau_{aa}}] \}. \quad (A. 18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_m^- = & 2Q_m^a (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ \exp(-iQ_m^a D) + \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 - iQ_m^b D] \\
& - \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)D] - \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] \}, \\
c_m^+ = & 2Q_m^a (Q_m^a - Q_m^b) (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp(iQ_m^a D) + \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - iQ_m^b D] \\
& - \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)D] - \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \}, \\
c_m^- = & 2Q_m^a (Q_m^a - Q_m^b) (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp(-iQ_m^a D) + \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 + iQ_m^b D] \\
& - \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)D] - \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1] \}, \\
c_m^+ = & 2Q_m^a (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ \exp(iQ_m^a D) + \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 + iQ_m^b D] \\
& - \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)D] - \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1] \}. \quad (A. 19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{Lb',Lb}^{\alpha\beta} = & 8\pi^2 i A^{-1} \sum_m (D_m Q_m^b)^{-1} \{ F_{1bm\beta} Y_{Lb'}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) [Y_{Lb}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) d_m^- e^{iQ_m^b \tau_{bb}} \\
& + Y_{Lb}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) d_m^+ e^{-iQ_m^b \tau_{bb}}] \\
& + F_{2bm\beta} Y_{Lb'}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) [Y_{Lb}(\mathbf{k}_m - \mathbf{Q}_m^b) d_m^+ e^{iQ_m^b \tau_{bb}} \\
& + Y_{Lb}(\mathbf{k}_m + \mathbf{Q}_m^b) d_m^+ e^{-iQ_m^b \tau_{bb}}] \}. \quad (A. 20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_m^- = & 4Q_m^a Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)(z_1 - D)] - \exp(-iQ_m^b D) - 1 \} \\
& + \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] - (Q_m^a - Q_m^b)^2 (Q_m^a \\
& + Q_m^b)^{-2} \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 + iQ_m^a D], \\
d_m^+ = & (Q_m^a - Q_m^b) (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)(z_1 - D)] \\
& - \exp[-i(Q_m^a - Q_m^b)(z_1 - D)] \}, \\
d_m^- = & (Q_m^a - Q_m^b) (Q_m^a + Q_m^b)^{-1} \{ \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] \\
& - \exp[-i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 + iQ_m^a D] \}, \\
d_m^+ = & 4Q_m^a Q_m^b (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \{ \exp[i(Q_m^a + Q_m^b)z_1 - iQ_m^a D] - \exp(iQ_m^b D) - 1 \} \\
& + \exp[i(Q_m^a - Q_m^b)(z_1 - D)] - (Q_m^a - Q_m^b)^2 (Q_m^a + Q_m^b)^{-2} \exp[-i(Q_m^a \\
& + Q_m^b)(z_1 - D)]. \quad (A. 21)
\end{aligned}$$

(A. 10) 式有非零解的条件决定 LUCS 的能谱。为了作自洽的计算, 可以将以上方案与密度泛函理论^[10]结合起来执行。

参 考 文 献

- [1] I. K. Schuller, *Phys. Rev. Lett.* **44**(1980), 1597.
- [2] I. K. Schuller and C. M. Falco, *AIP Conf. Proc.* **58**(1979), 197; I. K. Schuller *et al.*, Research Summaries, Solid State Division, Argonne National Lab., Oct. 1 (1979) —Sept. 30 (1980), pp. 43—44; Newsletter, Solid State Division, Argonne National Lab., July, (1980).
- [3] D. Allender *et al.*, *Phys. Rev. B*, **7**(1973), 1020.
- [4] D. Kalkstein and P. Soven, *Surface Science*, **26**(1971), 85.
- [5] A. Yaniv, *Phys. Rev. B*, **17**(1978), 3904.
- [6] 蔡学渝、尹道乐, *物理学报*, **30** (1981), 700.
- [7] O. K. Andersen, In "Computational Methods in Band Theory", edited by P. M. Marcus, J. F. Janak and A. R. Williams, Plenum Press, New York, (1971), p. 178.
- [8] 章立源、尹道乐, *物理学报*, **29**, (1980) 978.
- [9] H. Krakauer and B. R. Cooper, *Phys. Rev. B*, **16**(1977), 605.
- [10] A. J. Freeman, *物理学进展*, **1**(2)(1981).

A TIGHT-BINDING CALCULATION OF ELECTRONIC STATES OF LAYERED ULTRA-THIN COHERENT STRUCTURES¹⁾

XIONG SHI-JIE CAI JIAN-HUA

(Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

The present article gives an account of a calculation of the sub-band structure and atomic plane projected electronic local densities of states of a simplified model of the newly appeared synthetic materials, Layered Ultra-thin Coherent Structures (LUCS), by means of the Green's function method in the tight-binding approximation including the nearest neighbor matrix elements only. A formulation of a more accurate method for the same purpose in terms of linear combinations of muffin-tin orbitals and interface plane wave orbitals is given in the appendix.

1) A brief account of part of this paper has been accepted by the Conference LT-16.