

f.c.c./f.c.c. LUCS 的电子结构

尹真 马红儒 薛登平 蔡建华

(南京大学固体物理研究所)

1983年2月1日收到

提 要

在只计入最近邻间相互作用的紧束缚近似下, 计算了由两种面心立方金属组成的多层超薄共格结构 (LUCS) 的电子能谱和态密度。

熊诗杰和作者之一^[1,2], 建立了在只考虑最近邻间相互作用的紧束缚近似下, 利用格林算子技术计算多层超薄共格结构 (LUCS) 的电子结构的方法。作为最简单的应用的例子, 文献 [2] 中给出了由两种简立方金属组成的 LUCS 的电子亚能带色散曲线及投影在一个超晶格元胞中各个原子平面上的态密度曲线。这样的计算及其结果, 至少可以定性地适用于由过渡金属组成的 LUCS。为了实际地考察过渡金属 LUCS 的电子结构, 我们对于由两种面心立方结构的金属 (例如 Ni 和 Cu) 组成的 LUCS 作了计算。

为了节省篇幅, 直接引用文献 [2] 的公式和符号 (凡冠有编号 II 的公式, 均引自该文), 关于它们的说明, 可直接参阅该文献。

按照文献 [2], 采用混合的 Bloch-Wannier 表象。在这个表象中, 在只计入最近邻间相互作用的紧束缚近似下, 大块金属的单电子哈密顿量的矩阵元, 由 (II. 2) 式给出。令 (k_x, k_y, k_z) 为立方晶体沿三个互相正交的晶轴的 Bloch 波矢, 则大块金属在只计入最近邻间相互作用的紧束缚近似下, 有面心立方结构的单电子能谱为^[3]

$$E(k_x, k_y, k_z) = 4T \left[\cos\left(\frac{k_x d}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y d}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y d}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z d}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_z d}{2}\right) \cos\left(\frac{k_x d}{2}\right) \right]. \quad (1)$$

如文献 [2] 所述, 应用格林算子技术来计算 LUCS 电子结构的方法是, 首先从两种大块金属切出一片片的薄膜, 然后把一片片的薄膜交替地叠起来, 并且引入相邻膜的界面两侧原子之间的耦合。为了从 (1) 式确定矩阵元 (II. 2) 式的具体形式, 还需要指定沿大块晶体的什么晶面来切出薄膜, 也就是要指定 LUCS 的各个界面平行于什么晶面, 或者说规定 (II. 2) 式的 $k_{\parallel}$ 和 $k_{\perp}$ 的方向。这可以通过如下的代换^[4]来完成:

$k_{\perp}$ 垂直 (001) 面

$$k_x = k_1, \quad k_y = k_2, \quad k_z = k_{\perp}. \quad (2)$$

$k_{\perp}$ 垂直 (110) 面

$$k_x = \frac{\sqrt{2}}{2} (k_\perp - k_1), \quad k_y = k_2, \quad k_z = \frac{\sqrt{2}}{2} (k_\perp + k_1). \quad (3)$$

$k_\perp$ 垂直 (111) 面

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{1}{\sqrt{3}} k_\perp - \frac{1}{\sqrt{2}} k_1 - \frac{1}{\sqrt{6}} k_2, & k_y &= -\frac{1}{\sqrt{3}} k_\perp + \sqrt{\frac{2}{3}} k_2, \\ k_z &= \frac{1}{\sqrt{3}} k_\perp + \frac{1}{\sqrt{2}} k_1 - \frac{1}{\sqrt{6}} k_2. \end{aligned} \quad (4)$$

以上 k_1 和 k_2 是 $k_\parallel$ 的分量。下面我们将给出界面平行于 (111) 晶面的结果。此时, 按 (1) 和 (4) 式, 有

$$W(k_\parallel) = 2T \left[\cos\left(\frac{k_1 d}{\sqrt{2}}\right) + 2 \cos\left(\frac{k_1 d}{2\sqrt{2}}\right) \cos\left(\frac{3k_2 d}{2\sqrt{6}}\right) \right], \quad (5)$$

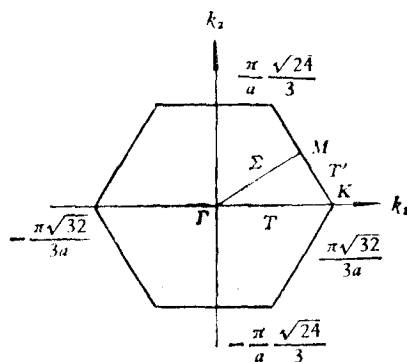


图 1 面心立方晶格 (111) 面的表面布里渊区

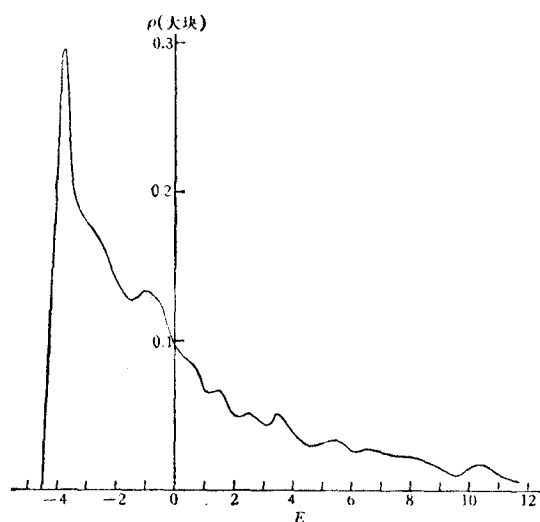


图 2 f.c.c. 结构大块金属的投影到 (111) 面的态密度曲线

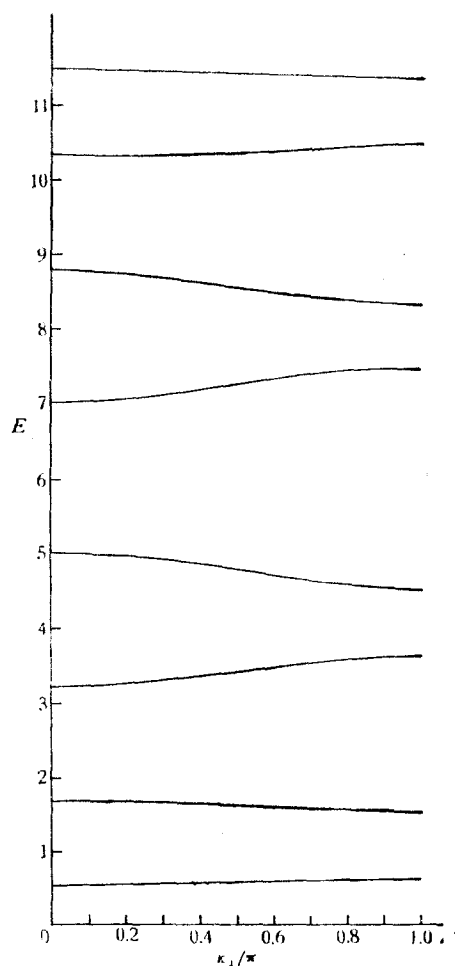
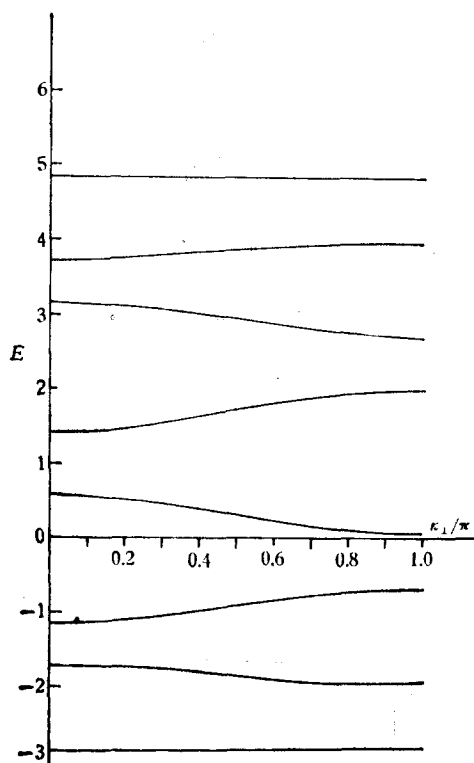
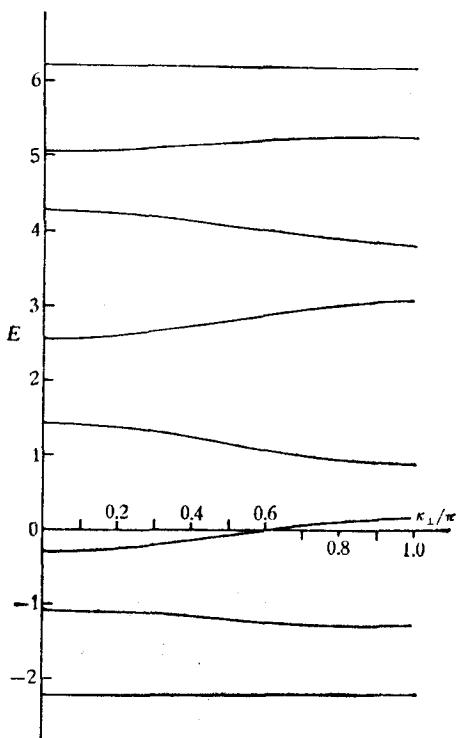


图 3 $\kappa_1 = 0, \kappa_2 = 0$ 的色散曲线

图 4 $\kappa_1 = 2\pi/3, \kappa_2 = 0$ 的色散曲线图 5 $\kappa_1 = \pi/2, \kappa_2 = \pi/4$ 的色散曲线

$$T(k_{\parallel}) = T \left[1 + 4 \cos \frac{2k_1 d}{2\sqrt{2}} + 4 \cos \left(\frac{k_1 d}{2\sqrt{2}} \right) \cos \left(\frac{3k_2 d}{2\sqrt{6}} \right) \right]^{1/2}. \quad (6)$$

LUCS 的电子能谱由 (II.18) 式的零点确定, 局域态密度则由 (II.20) 式给出. 顺便指出, 格林算子可以表示成

$$\hat{G}(E) = \sum_n |E_n\rangle (E - E_n - i0^+)^{-1} \langle E_n|, \quad (7)$$

它的虚部为

$$\text{Im} \hat{G}(E) = \pi \sum_n |E_n\rangle \delta(E - E_n) \langle E_n|. \quad (8)$$

这里 $|E_n\rangle$ 是哈密顿 $\hat{H}$ 的全套本征矢. 由此可见

$$\rho(E, k) = \pi^{-1} \langle k | \text{Im} \hat{G}(E) | k \rangle = \sum_n |\langle k | E_n \rangle|^2 \delta(E - E_n) > 0. \quad (9)$$

也就是 (II.20) 式的被积函数恒正. 因此, 在作积分时, 可以省略被积函数中的符号函数, 而对被积函数加上取绝对值.

图 1 是表示积分区间的二维 Brillouin 区. 图 2 是投影到一个原子平面上的大块金属的态密度曲线. 在取下列参数值

$$T = t = 1, \quad v_a = -v_b = 0.5, \quad l_a = l_b = 4, \quad U_a = U_b = 0 \quad (10)$$

情况下, 图 3 至图 6 是对应于二维 Brillouin 区中不同点的色散曲线, 其中

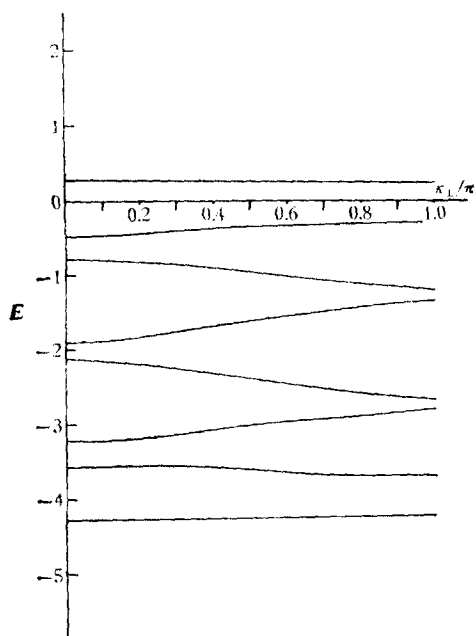
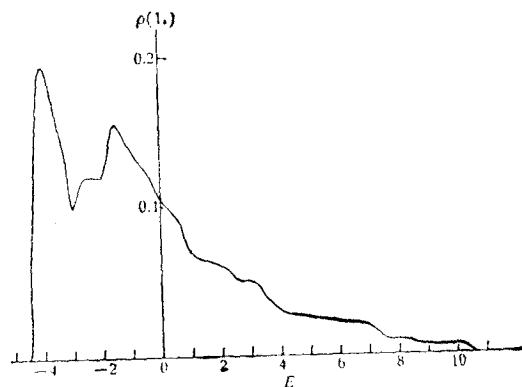
图6 $\kappa_1 = \pi, \kappa_2 = \pi/2$ 的色散曲线

图7 f.c.c./f.c.c. LUCS 投影在A种金属膜的(111)面的第一层原子平面上的局域态密度

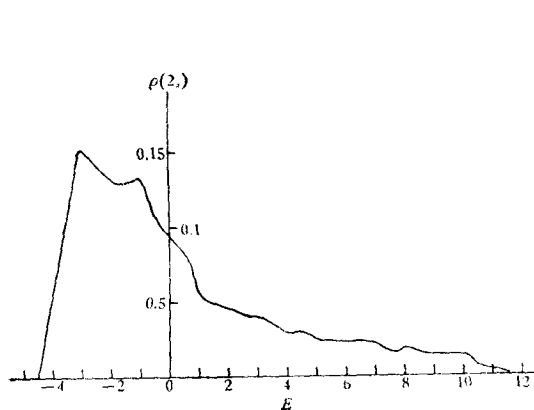


图8 f.c.c./f.c.c. LUCS 投影在A种金属膜的(111)面的第二层原子平面上的局域态密度

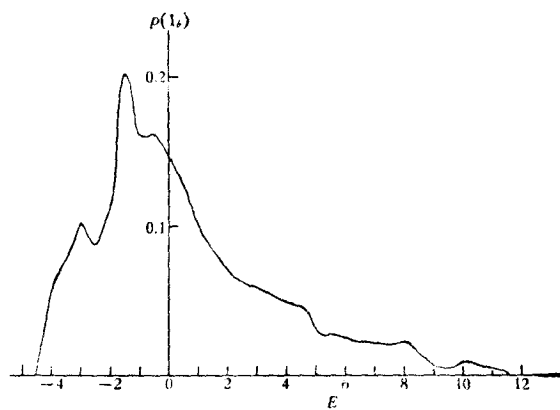


图9 f.c.c./f.c.c. LUCS 投影在B种金属膜的(111)面的第一层原子平面上的局域态密度

$$\kappa_{\perp} = k_{\perp} D, \quad \kappa_1 = \frac{k_1 d}{\sqrt{2}}, \quad \kappa_2 = \frac{3k_2 d}{2\sqrt{6}}.$$

$-\pi \leq \kappa_{\perp} \leq 0$ 部分的色散曲线与 $0 \leq \kappa_{\perp} \leq \pi$ 部分对称,故不画出。图7至图10则是投影在一个超元胞的各原子平面上的局域态密度。从图3至图6,明显可以看出电子的亚能带态分为两类:一类的能量值与 $\kappa_{\perp}$ 有明显的依赖关系;另一类的能量值则几乎不随 $\kappa_{\perp}$ 变化。这一情况,对于 LUCS 的一些性质,如电阻率等,有重要的影响。

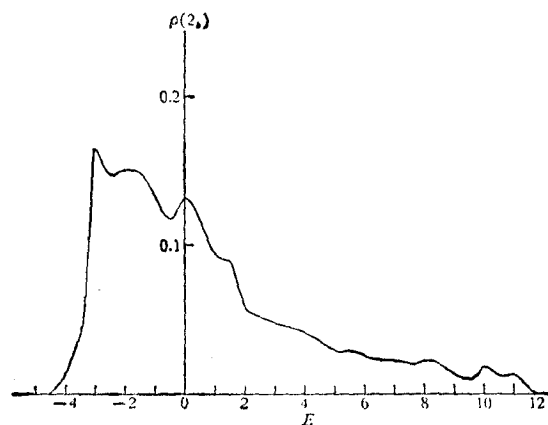


图 10 f.c.c./f.c.c. LUCS 投影在 B 种金属膜的 (111) 面的第二层原子平面上的局域态密度

这项工作得到中国科学院基金委员会的支持 [(82) 基金数准字第 044 号]。在工作过程中熊诗杰同志参与讨论。在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] Xiong Shi-jie and Tsai Chien-hua, *Physica B*, **108**(1981), 949.
- [2] 熊诗杰、蔡建华, 物理学报, **31**(1982), 474.
- [3] N. F. Mott and H. Jones, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Clarendon Press, Cambridge, (1936), pp. 65—68.
- [4] G. Allan and P. Lengart, *Surface Science*, **30**(1972), 641.

THE ELECTRONIC STRUCTURE OF f. c. c./f. c. c. LUCS

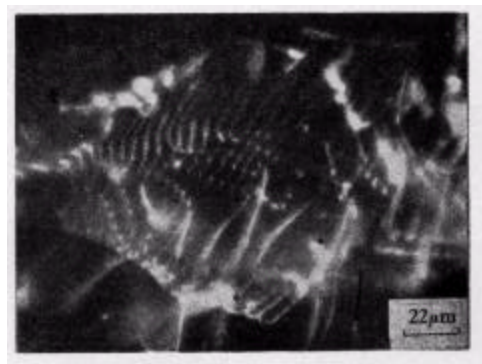
YIN ZHEN MA HONG-RU XIE DENG-PING

CAI JIAN-HUA (C. H. TSAI)

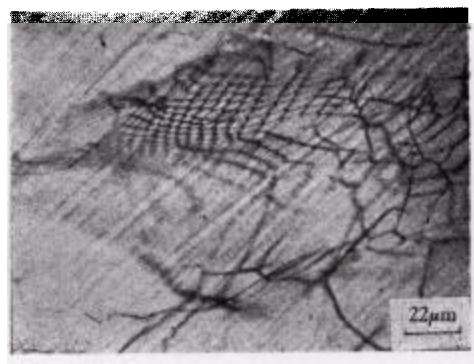
(*Institute of Solid State Physics, Nanjing University*)

ABSTRACT

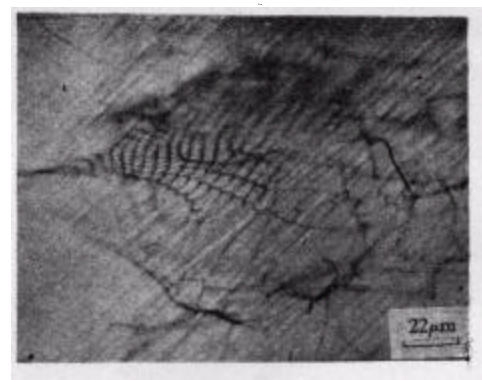
The present note gives the results of computations of the electronic energy spectrum and local density of state of layered ultrathin coherent structures composed of two face-centered-cubic metals under the tight-binding approximation with inclusion of only nearest neighbor interactions.



(a) 超显微法观察的结果

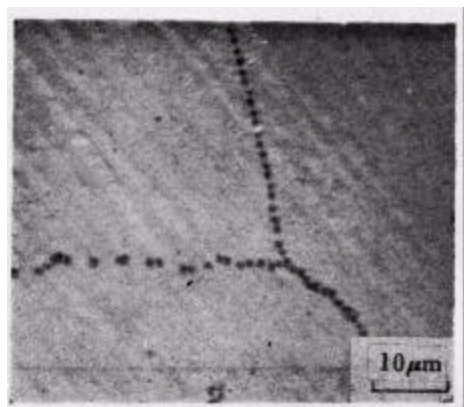


(b) 同区域用透射法观察的结果

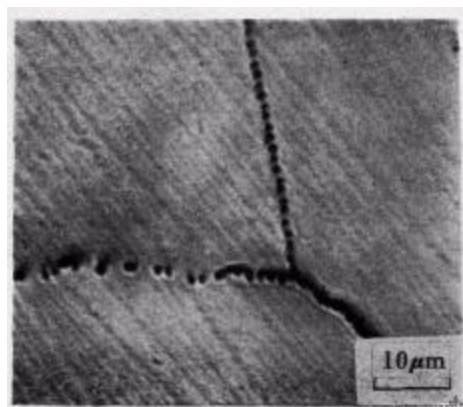


(c) 同一区域用逐层透射法观察的结果
(即聚焦于图 (b) 焦平面下 $25\mu\text{m}$ 处)

图 3 LiNbO_3 晶体中扭转亚晶界

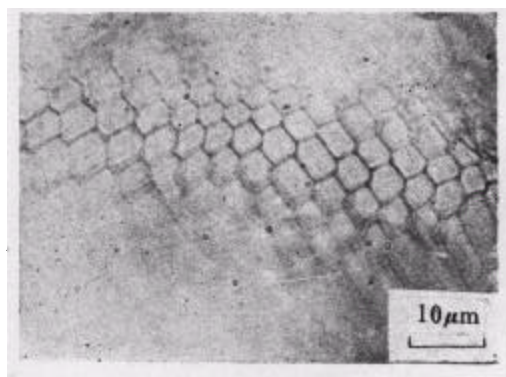


(a) 浸蚀法所得结果

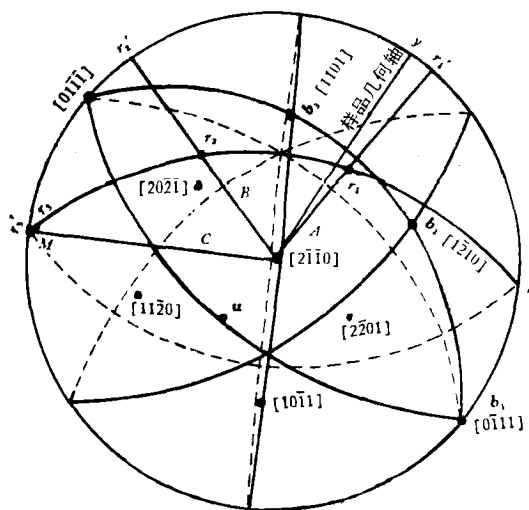


(b) 与 (a) 同一区域用透射法所得结果

图4 LiNbO_3 晶体中三叉亚晶界



(a) LiNbO_3 晶体 a 面上位错网



(b) 图 (a) 的极图分析

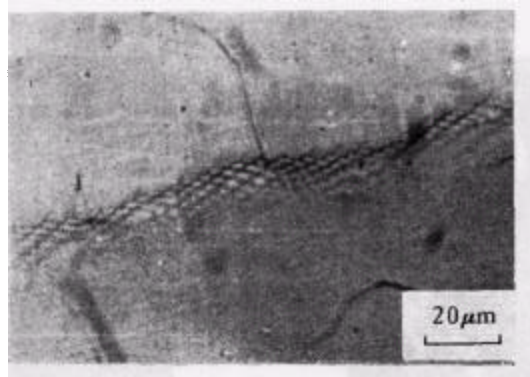
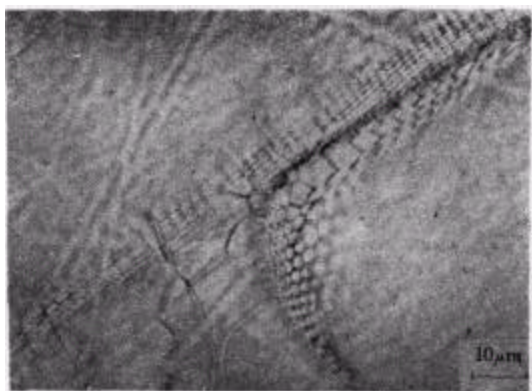
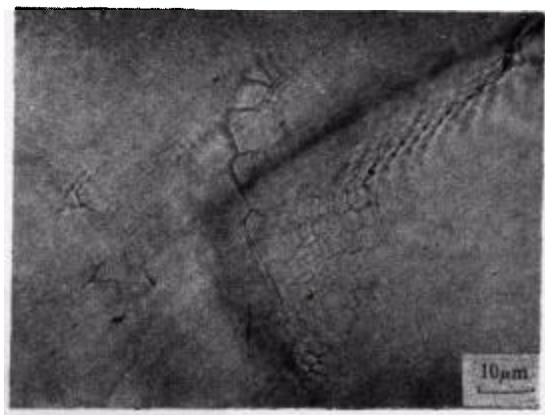


图6 LiTaO_3 晶体 c 面上位错网



(a)



(b)

图7 LiNbO_3 晶体中位错网

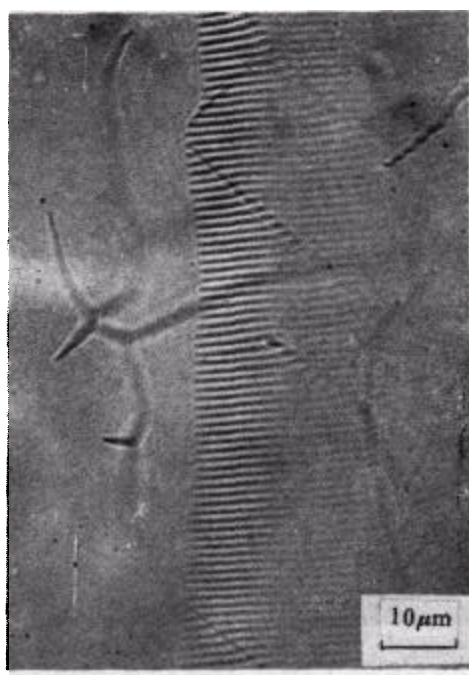


图8 LiTaO_3 晶体中对称倾侧型亚晶界(平行线)

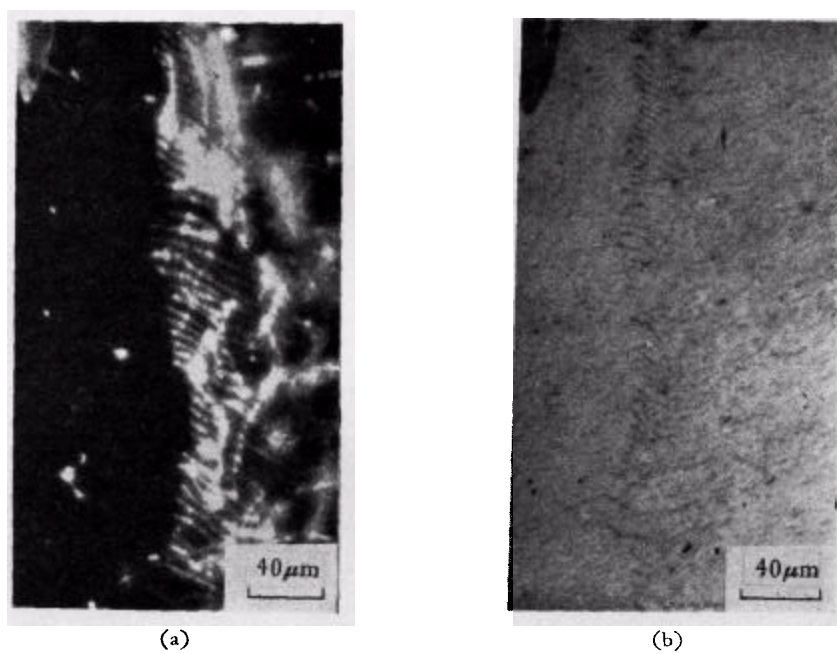


图 9 LiTaO_3 晶体中用两种观察方法获得的倾斜亚晶界

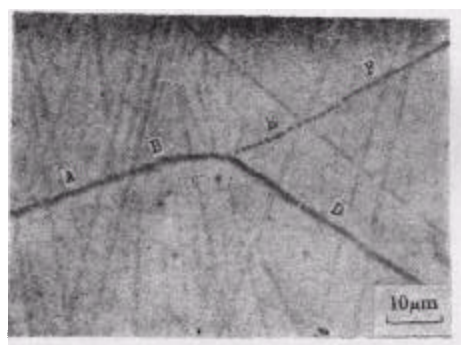


图 10 LiNbO_3 晶体中三叉亚晶界(观察面为 a 面, 浸蚀后为菱形蚀坑)

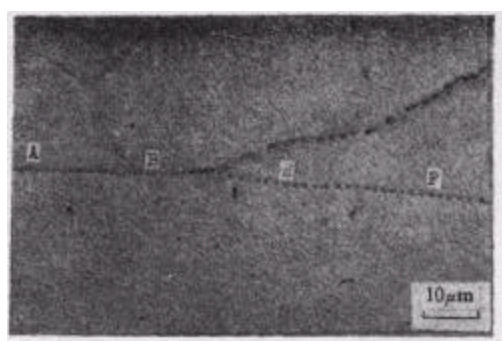


图 11 LiTaO_3 晶体中三叉亚晶界(观察面为 c 面, 浸蚀后为圆锥形蚀坑)