

依赖能量的光电子衍射曲线 Fourier 变换分析方法的研究(I)*

以 Ni(001) 为衬底的系统

唐 景 昌 黄 绮
(浙江大学物理系) (中国科学院物理研究所)

1984年3月20日收到

提 要

本文研究了氧族元素 S 和 Se 在 Ni(001) 衬底上形成的 $P(2 \times 2)$ 和 $C(2 \times 2)$ 两种结构吸附系统依赖于能量的光电子衍射曲线的直接 Fourier 变换分析方法,考虑了在不同能量范围内作 Fourier 变换对峰值位置的影响,求得了这些系统的各级层距修正值 Δ_c ,讨论了利用这些 Δ_c 值和实验 EDPDFT 数据来决定表面结构的可能性。

一、引 言

从 1981 年开始,固体表面结构研究中出现了一种新方法,即依赖能量的光电子衍射曲线 (Energy-Dependent Photoelectron Diffraction, 以下简称 EDPD) Fourier 变换分析方法 (以下简称 FT)^[1-5]。这种方法是由扩展 X 射线吸收边精细结构的研究中得到启示的,这是由于 EDPD 与 EXAFS 有相似的物理实质。

在 EXAFS 过程中,中心原子吸收光子,发射电子波,经过邻近原子的背散射,使得中心原子的跃迁几率受到调制,因而可以观察到 X 射线吸收系数在吸收边约 50eV 以上有振荡线现象。可证明 EXAFS 函数为^[6]

$$\chi(k) \sim -\frac{1}{kr^2} |f(k, \pi)|^2 \sin(2kr + \phi(n) + 2\delta(c)), \quad (1)$$

其中 $2kr$ 为传播相移, $2\delta(c)$ 为中心原子散射引起的相移, $\phi(n)$ 为邻近原子背散射引起的相移。

EDPD 过程发生在吸附原子直接向上发出的光电子波 $A^{(-)}$ 与向下发出的光电子波 $A^{(+)}$ (包括反射与透射)之间的干涉,形成总的出射电子波。其总相移为

$$2kd_{\perp}^2 + \phi_a + \phi^+ - \phi^-,$$

每项的物理意义在下面讨论。由此可知,EDPD 与 EXAFS 都具有相似的衍射机制,当

* 中国科学院科学基金资助的课题。

$$\sum_{L_i} C_{L_i}^{\beta} R_{L_i}^{\beta} Y_{L_i}(\mathbf{r}_{\beta})$$

为原子 β 的初始波函数; $\mathbf{A} \cdot \nabla V(\mathbf{r}_{\beta})$ 为光子与 β 原子的相互作用; $e^{i\delta_{l'}^{\beta}} R_{l'}^{\beta} Y_{l'}^*(\mathbf{r}_{\beta})$ 为原子在受激后的波函数; 光电子在层 q 内经受的多次散射由 $(1 - X^q)_{LL'}^{-1}$ 表示. $\mathbf{k}$ 为光电子波矢, $\mathbf{k}^-$ 指向真空区域(向上), $\mathbf{k}^+$ 指向固体内部(向下), 球谐函数描述光电子的方向.

由(4)式可知, 初态电子角动量为 l_i , 光子角动量为 1. 因而光电子角动量只能取 $l' = l_i \pm 1$. 在 EDPD 中, 常取光电子能量大于 50eV, 在这个能量范围内, 电子在原子层 q 内的多次散射可忽略, 即 $(1 - X^q)_{LL'}^{-1} \approx 1$, 使得 $l = l'$, 因此(2)式中光电子源 $A^q(\mathbf{k}^{\pm})$ 就具有确定的相因子, 它仅由 $Y_L(\mathbf{k}^{\pm})$ 决定. 取 $\mathbf{k}^-$ 为极轴方向, 记

$$Y_L(\mathbf{k}^-) = Y_L(0, \varphi),$$

则 $Y_L(\mathbf{k}^+)$ 可通过 $Y_L(\mathbf{k}^-)$ 表示

$$Y_L(\mathbf{k}^+) = Y_L(\pi, \varphi) = (-1)^l Y_L(0, \varphi) = (-1)^l Y_L(\mathbf{k}^-). \quad (5)$$

可见向上与向下发射的光电子源 $A(\mathbf{k}^-)$ 和 $A(\mathbf{k}^+)$ 的相对相位是确定的. 令 ϕ^+ 与 ϕ^- 分别表示 $A(\mathbf{k}^+)$ 与 $A(\mathbf{k}^-)$ 的相位, 则有

$$\phi^+ - \phi^- = (-1)^l \pi = (-1)^{l_i+1} \pi. \quad (6)$$

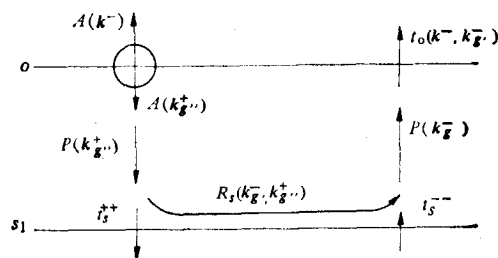


图2 光电子在吸附层(o)和衬底(s)之间的传播和散射过程

光电子衍射的第二步是讨论光电子在吸附层与衬底之间的传播和散射, 这与低能电子衍射 (LEED) 是相似的(见图2). 用 $P(\mathbf{k}_g^{\pm})$ 表示层间传播, 用 $R_s(\mathbf{k}_g^{\pm}, \mathbf{k}_g^{\mp})$ 表示在 s 层的反射, 用 $t_0(\mathbf{k}^-, \mathbf{k}_g^-)$ 表示在吸附层的透射. 在忽略背散射中的高次项近似下, 从表面垂直出射的光电子强度可以表示为^[3]

$$I \sim \left| A(\mathbf{k}^-) + \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} t_0(\mathbf{k}^-, \mathbf{k}_g^-) P(\mathbf{k}_g^-) R_s(\mathbf{k}_g^-, \mathbf{k}_g^+) P(\mathbf{k}_g^+) A(\mathbf{k}_g^+) \right|^2. \quad (7)$$

EDPD 的调制函数定义为

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{I - I_A}{I_A}. \quad (8)$$

将(7)式代入(8)式, 并设衬底有 N 层, 由文献[4]可得

$$\chi(\mathbf{k}) = 2 \sum_{a=1}^N R'_a \cos(2kd_{\perp}^a + \phi_a + \phi^+ - \phi^-) e^{-2\tau d_{\perp}^a}. \quad (9)$$

将(6)式代入(9)式, 令 $R_a = 2R'_a e^{-2\tau d_{\perp}^a}$, 则

$$\chi(\mathbf{k}) = (-1)^{l_i+1} \sum_{a=1}^N R_a \cos(2kd_{\perp}^a + \phi_a). \quad (10)$$

I_A 为类原子光电子发射强度; R_α 为与 α 层有关的振幅, 它与位相无关; ϕ_α 为散射引起的相移. 比较(1)式与(10)式, 可以看出 EDPD 与 EXAFS 的差别, (10)式中不含中心原子相移 $2\delta(c)$.

$\chi(k)$ 的直接 FT 定义为

$$F(d_\perp) = \int_0^\infty \chi(k) e^{-2ikd_\perp} dk. \quad (11)$$

将(10)式代入, 求得 $F(d_\perp)$ 应是一系列 (N 个) 分立的线段, 其位置由 $d_\perp^a(\text{FT})$ 表示为

$$d_\perp^a(\text{FT}) = d_\perp^a + \frac{\phi_\alpha}{2k}, \quad (12)$$

其中 $d_\perp^a$ 为真实层距, 由相移引起的层距修正值为

$$\Delta_\alpha(\text{FT}) = \frac{\phi_\alpha}{2k}. \quad (13)$$

由于真实的调制函数 $\chi(k)$ 远比(10)式复杂, 对其作 FT 将得到 $F(d_\perp)$ 的连续曲线, 它由一系列峰所组成. 其峰位仍由(12)式给出. 由以上讨论可知, 利用 EDPD 曲线的直接 FT 分析求表面层间距, 关键在于求出层距修正值 $\Delta_\alpha(\text{FT})$, 它由 k 与散射相移 ϕ_α 决定.

三、计算结果和讨论

1. Se 在 Ni(001) 面上的吸附

1) 系统 $C(2 \times 2)$ Se-Ni(001)

实验和理论都对此系统作过研究. LEED 研究结果^[12] 是 Se 原子吸附在衬底 Ni(001) 表面四度穴位, Se 原子与衬底之间的垂直距离为 $d_\perp^{\text{Se-Ni}} = 1.55 \text{ \AA}$. Shirley 等人对这个系统做了 EDPD 实验测量^[13], 理论分析由 Li 和 Tong (李财兴和唐叔贤) 完成^[14], 从理论与实验比较中确定了 Se 的吸附位和吸附距离, 与 LEED 相一致. 选择此系统研究 FT 分析法是为了便于检验 FT 方法的正确性.

本文在计算 EDPD I - V 曲线时选用了下列参数:

(1) 用原子团 Se-Ni₅ 的 Se(3d) 芯态作为 Se-Ni(001) 系统的初始波函数, 由原子团自洽计算求得 Se 原子对电子的散射相移 δ_l^{Se} ; 由 Ni 晶体势求得电子在衬底中的散射相移 δ_l^{Ni} ; $0 \leq l \leq 7$, 计算中总共用了八个 δ_l^{Se} 和八个 δ_l^{Ni} .

(2) 衬底 Ni(001) 晶体 Muffin-Tin 势常数 $V_{\text{in}} = 11.2 \text{ eV}$; 吸附层 Se 的表面势

$$V_o = V_{\text{in}}.$$

(3) 出射光电子能量范围为 $(100-600) \text{ eV}$.

为考察 EDPD FT 结果随 $d_\perp^{\text{Se-Ni}}$ 的变化规律, 在计算中假定 Se 原子到衬底的表面距离 $d_\perp^1 = d_\perp^{\text{Se-Ni}}$ 取三个值: $1.43 \text{ \AA}$, $1.63 \text{ \AA}$ 和 $1.83 \text{ \AA}$, 由 Ni 晶格常数 $a = 2.49 \text{ \AA}$, 可求得衬底中各层之间的垂直距离 $b = 1.76 \text{ \AA}$, 显然 $d_\perp^1 + nb$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) 为 Se 原子到衬底各层之间的垂直距离. 在上述假定之下, 分别计算了与各 $d_\perp^1$ 对应的 EDPD 调制函数 $\chi(E)$, 完成 FT 分析, 求得三组层距修正值 $\Delta_\alpha(\text{FT})$. 图 3 给出 $d_\perp^{\text{Se-Ni}} = 1.63 \text{ \AA}$ 的典型 $\chi(E)$ 函数, 在作 FT 时, 将能量宗量 E 按下式转换为 k (光电子波矢的数值):

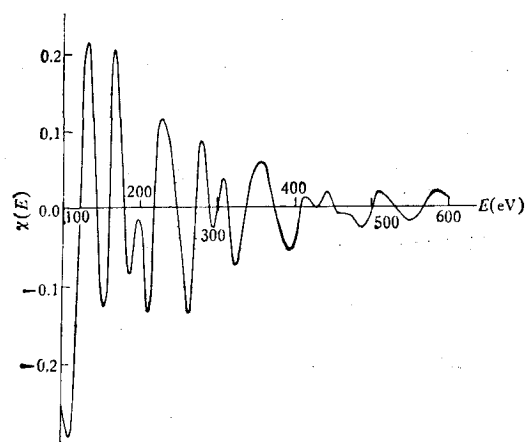


图3 系统 $C(2 \times 2)$ Se-Ni(001) 的 $\chi(E)$ 曲线 设 $d_{\perp}^{\text{Se-Ni}} = 1.63 \text{ \AA}$

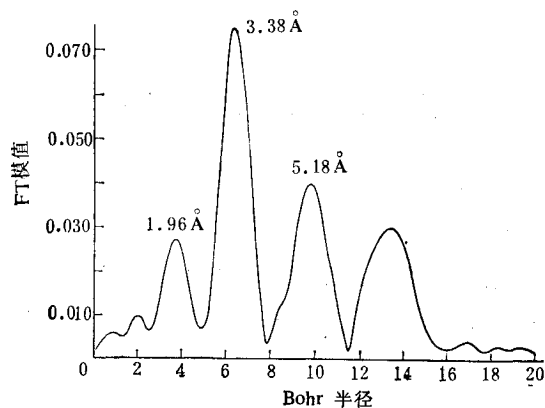


图4 系统 $C(2 \times 2)$ Se-Ni(001) EDPD FT 模值
 $d_{\perp}^{\text{Se-Ni}} = 1.63 \text{ \AA}$; 计算使用了 25 束电子波; 设
 Se 到衬底最外三层距为 $1.63 \text{ \AA}$, $3.39 \text{ \AA}$ 和 $5.16 \text{ \AA}$

表1 系统 $C(2 \times 2)$ Se-Ni(001) 的 EDPD FT 结果

衬底原子层序号 α	Se 原子到衬底各层距离 $d_{\perp}^{\alpha}(\text{\AA})$	FT 峰值位置 $d_{\perp}^{\alpha}(\text{FT})(\text{\AA})$	层距修正值 $\Delta_{\alpha}(\text{FT})(\text{\AA})$ $d_{\alpha}(\text{FT}) - d_{\perp}^{\alpha}$
1	1.43	1.85	0.42
	1.63	1.96	0.33
	1.83	2.06	0.23
2	3.19	3.12	-0.07
	3.39	3.38	-0.01
	3.59	3.62	0.03
3	4.96	4.89	-0.07
	5.16	5.18	0.02
	5.36	5.42	0.06

$$k = \left[\frac{2m}{\hbar^2} E \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (14)$$

其中 E 为光电子在真空中的动能, $\chi(E)$ 具有明显的振荡特性, 在 100eV 到 600eV 之间, 最大振荡约为 0.3. 比 EXAFS 谱中的振荡大得多, 且振幅随 k 的增大而递减也比 EXAFS 缓慢.

图 4 为这个系统 EDPD FT 模值的典型例子, 表 1 中列出了 FT 峰位及各个层距修正值. 从图 4 中可以看出四个明显的峰, 它们与 Se 原子到 Ni(001) 衬底的最外四个原子的垂直距离相对应. 曲线首尾两端呈现微小振荡, 不能用于分析表面结构.

2) 系统 $P(2 \times 2)$ Se-Ni(001)

系统 $P(2 \times 2)$ Se-Ni(001) 与 $C(2 \times 2)$ Se-Ni(001) 一样都是研究得相当成熟的系统^[14,15], 结论也一致, 即 Se 原子在 Ni(001) 衬底上取四度穴位, 吸附距离 $d_{\text{I}}^{\text{Se-Ni}} = 1.55 \text{ \AA}$. 事实上, 对于这两个系统, Se 原子周围情况相似, 均有四个最近邻 Ni 原子, 不同的是 $P(2 \times 2)$ 系统的表面二维元胞面积比 $C(2 \times 2)$ 系统大一倍, 因而分别含一个 Se 原子和两个 Se 原子, 因此这两个系统只在吸附层中有少许差别. 对 EDPD 来说, 能量高于 50eV 的光电子在吸附层内部的多次散射并不重要, 因而其光电子衍射效应大致相似, 在理论计算中我们选取了相同的参数. 图 5 为这两个吸附层的比较. 图 6 为典型的 FT 模值曲线.

在计算中仍假定三个 Se 原子的吸附距离为 $d_{\text{I}}^{\text{Se-Ni}} = 1.55 \text{ \AA}$, $1.64 \text{ \AA}$ 和 $1.73 \text{ \AA}$, 完成 EDPD FT, 求得各级 $\Delta_a(\text{FT})$ (见表 2). 在图 6 的 FT 曲线中也存在四个主要峰, 不过第四个峰为双峰, 所以我们一般只分析前三个峰.

比较 $C(2 \times 2)$ 和 $P(2 \times 2)$ 两个系统的各级层距修正值, 我们发现两者十分接近, 例如 Δ_1 数值在 $(0.2-0.4) \text{ \AA}$ 之间, Δ_2 和 Δ_3 都很小, 即 FT 峰位很接近假定的 d_{I}^{Se} 值. 从物理实质来看, 两个系统具有相同的衬底和相同的吸附元素, 光电子在衬底中的衍射过程完全相同; 在吸附层中的光电子均来自 Se 原子的 3d 芯态能级, 吸附层又都是 Se 原子的稀疏结构, 散射过程近似相同, 而且吸附层内的多次散射均比较弱, 这样必然导致这两个系统 EDPD FT 结果非常相近.

在图 7 中我们将表 1 和表 2 的数据描绘在一起, 横座标为 d_{I}^{Se} , 纵座标为各级 FT 峰位 $d_a(\text{FT})$, 并给出 $\Delta_a = 0$ 的直线. 两个系统的 Δ_2 和 Δ_3 数据均落在(或接近)这条直线, 特别当选取 d_{I}^{Se} 接近真实层距时, 这种规律尤其明显. Δ_1 的数据分布在平行 $\Delta_a = 0$ 的直线上. 利用“强散射中心”的假设, 可以定性解释这种规律性.

在图 8 中描绘了吸附原子以及 Ni 衬底的最外三个原子层, Se 原子的最近邻是四个

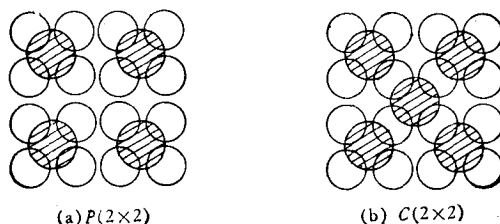


图 5 $P(2 \times 2)$ 与 $C(2 \times 2)$ 结构比较

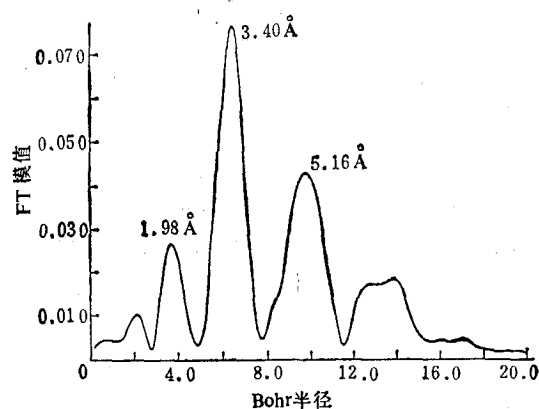
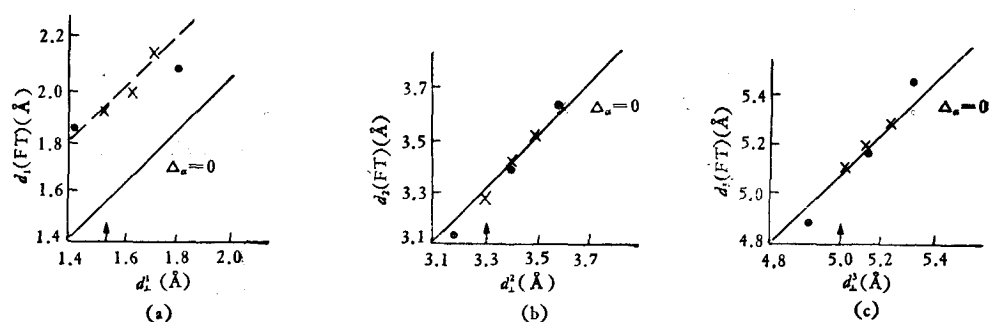
图6 $P(2 \times 2)$ Se-Ni(001) 的 EDPD FT 模值

表2 系统 $P(2 \times 2)$ -Ni(001) EDPD FT 的各级 $\Delta_a(\text{FT})$ 值
(计算使用了 41 束电子波, Se 到衬底各层距为 1.64 Å, 3.40 Å 和 5.17 Å)

衬底原子序号 α	假定 Se 原子到衬底各层的距离 $d_i^a(\text{Å})$	FT 峰值位置 $d_i^a(\text{FT})(\text{Å})$	层距修正值 $\Delta_a(\text{FT})(\text{Å})$ $d_a(\text{FT}) - d_i^a$
1	1.55	1.91	0.36
	1.64	1.98	0.34
	1.73	2.13	0.40
2	3.31	3.26	-0.05
	3.40	3.40	0.00
	3.49	3.50	0.01
3	5.08	5.09	0.01
	5.17	5.16	-0.01
	5.26	5.25	-0.01

图7 Se-Ni(001) 系统 EDPD FT 峰位与层距 d_i^a 的关系

(a), (b), (c) 分别指第一、二、三 FT 峰位随 d_i^a 的变化曲线; ●和×分别为 $C(2 \times 2)$ 与 $P(2 \times 2)$ 吸附系统的数据;
↑处为真实层距位置

Ni 原子, 位于平面(1)中, 分别用数字 1, 2, 3, 4 表示, 它们是平面(1)的强散射中心. 平面(2)中的强散射中心是 Ni 原子 5, 位于 Se 的正下方, 因此它对电子的背散射最强. 平面(3)的强散射中心又是四个 Ni 原子, 用 6, 7, 8 和 9 表示. 现以 $d_{\perp}^{\text{Se-Ni}} = 1.55 \text{ \AA}$ 为例, 计算光电子的散程差,

$$r + d_{\perp}^1 = (\sqrt{1.55^2 + 1.76^2} + 1.55) \text{ \AA} = 3.89 \text{ \AA}.$$

由表 2 查得第一 FT 峰位的二倍为 $3.82 \text{ \AA}$ 与 $3.89 \text{ \AA}$ 相近, 说明第一 FT 峰位主要由强散射中心 1, 2, 3, 4 所贡献. 同样可得出第二 FT 峰位主要由 Ni 原子 5 所贡献, 由表 2 可知 $d_2(\text{FT})$ 与 $d_{\perp}^1$ 之差只有 $0.05 \text{ \AA}$, 在定性上是符合的. 至于第三个 FT 峰位, 常常因为 $d_{\perp}^1 \gg 1.76 \text{ \AA}$, 散程差主要由 $d_{\perp}^1$ 决定. 应该强调的是, “强散射中心”假设只能定性地讨论 FT 峰位以及层距修正值, 正确的分析只能依靠光电子衍射的动力学理论.

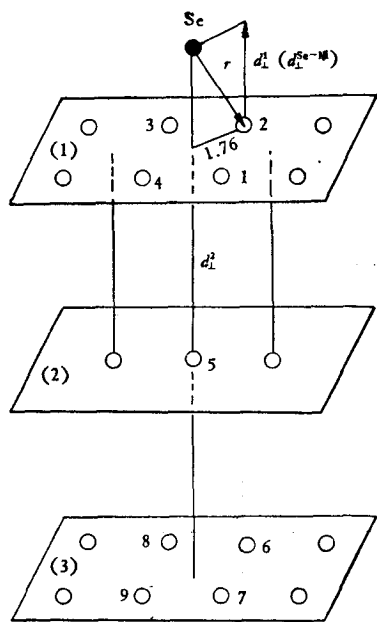


图 8 强散射中心示意图

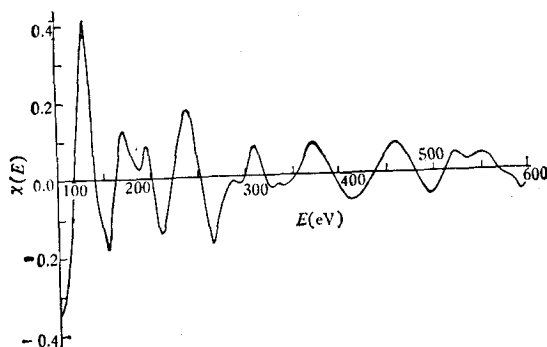


图 9 系统 $C(2 \times 2) S(2p)-Ni(001)$ 的 EDPD 调制 $\chi(E)$ 函数
 $d_{\perp}^{\text{Se-Ni}} = 1.41 \text{ \AA}$

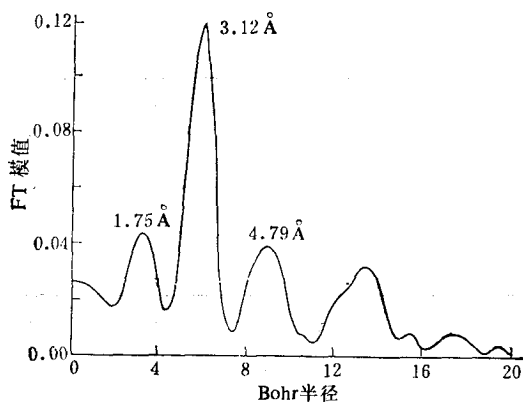


图 10 系统 $C(2 \times 2) S(2p)-Ni(001)$ EDPD 曲线的 FT 模值 能量范围为 $100-600 \text{ eV}$, 计算中使用 25 束电子波, 设 S 原子到衬底各层距离为 $1.41 \text{ \AA}$, $3.17 \text{ \AA}$ 和 $4.94 \text{ \AA}$

2. S 在 $Ni(001)$ 面上吸附

1) 系统 $C(2 \times 2) S(2p)-Ni(001)$

在理论和实验两方面, 这个系统也都已研究过. LEED 研究结果发生过分歧, Demuth

等人的结果是 S 原子的吸附距离 $d_{\perp}^{\text{S-Ni}} = 1.3 \text{ \AA}$ [16,17], Duke 等人结果是 S 原子的吸附距离 $d_{\perp}^{\text{S-Ni}} = 1.7 \text{ \AA}$ [18]. Tong 和 Kevan 的 EDPD 研究结果支持了 Demuth 的结论 [15]. 本文用 FT 方法来分析 EDPD 实验结果与 Kevan 和 Tong 的结论相符 [19], $d_{\perp}^{\text{S-Ni}} = (1.35 \pm 0.04) \text{ \AA}$, 这是 EDPD FT 方法的成功例子. Brennan 等人 [20] 的 EXAFS 实验结果为 $1.3 \text{ \AA} < d_{\perp}^{\text{S-Ni}} < 1.4 \text{ \AA}$, 与作者的结论一致. 理论计算参数选择如下: S-Ni(001) 吸附系统的表面势 $V_0 = 9.4 \text{ eV}$; 初始电子波函数是 S-Ni, 原子团的 S(2p) 芯态波函数; 由原子团自洽势求得 S 原子对电子的散射相移 δ_i^{S} , Ni 原子的散射相移 δ_i^{Ni} 则由 Ni 晶体势求得, 计算中使用了八个相移, $0 \leq l \leq 7$; 出射光电子的能量范围为 100—600 eV. 主要计算结果见表 3, 图 9, 图 10 为 $d_{\perp}^{\text{S-Ni}} = 1.41 \text{ \AA}$ 时的 EDPD 调制函数 $\chi(E)$ 及其 FT 模值曲线.

2) 系统 $P(2 \times 2)$ S(2p)-Ni(001)

这个系统与 $C(2 \times 2)$ S(2p)-Ni(001) 相似, 计算中取同样参数, 主要结果也列于表 3 中. 两个系统在表 3 中显示出很多相似之处. 在 FT 模值曲线上都存在三个以上明显的峰. 对应 $d_{\perp}$ 相近 (如 $1.41 \text{ \AA}$ 和 $1.44 \text{ \AA}$) 的情形, $\Delta_1(\text{FT})$ 分别为 $0.34 \text{ \AA}$, 和 $0.31 \text{ \AA}$, $\Delta_2(\text{FT})$ 分别为 $-0.05 \text{ \AA}$ 和 $0.00 \text{ \AA}$, $\Delta_3(\text{FT})$ 为 $-0.15 \text{ \AA}$ 和 $-0.05 \text{ \AA}$, 其中两个系统的 Δ_1 和 Δ_2 彼此接近, 只有 Δ_3 稍有差别.

表 3 系统 S-Ni(001) EDPD FT 结果

超 结 构	衬底原子层 序号 α	假定 S 原子到衬底 各层的距离 $d_{\perp}^{\text{S}}(\text{\AA})$	FT 峰值位置 $d_{\perp}^{\text{S}}(\text{FT})(\text{\AA})$	层距修正值 $\Delta_{\alpha}(\text{FT})(\text{\AA})$ $d_{\alpha}^{\text{S}}(\text{FT}) - d_{\perp}^{\text{S}}$
$C(2 \times 2)$	1	1.00	1.67	0.37
		1.41	1.75	0.34
		1.60	1.77	0.17
$P(2 \times 2)$	1	1.44	1.75	0.31
		1.64	1.98	0.34
		1.84	2.07	0.23
$C(2 \times 2)$	2	3.06	3.06	0.00
		3.17	3.12	-0.05
		3.37	3.44	0.07
$P(2 \times 2)$	2	3.20	3.20	0.00
		3.40	3.38	-0.02
		3.60	3.58	-0.02
$C(2 \times 2)$	3	4.83	4.67	-0.16
		4.93	4.79	-0.15
		5.13	5.00	-0.13
$P(2 \times 2)$	3	4.97	4.92	-0.05
		5.17	5.20	0.03
		5.37	5.29	-0.08

四、FT 能量范围对层距修正值的影响

由 FT 定义(11)式可知, EDPD FT 的能量范围为 $(0 \rightarrow \infty)$, 但实际上理论计算和实验测量的能量范围都有限, 特别是实验测量范围一般为 200eV 或 300eV, 即 (100—300)eV 或 (100—400)eV, 这样 FT 峰位就随能量范围而改变. 为了研究这种影响, 我们详细计算了系统 $C(2 \times 2)S(1s)-Ni(001)$ 在四个能量范围的 EDPD $I-V$ 曲线, 并完成 FT 分析, 求得层距修正值. 计算中设 S 原子的吸附距离为 $d_{\perp}^{S-Ni} = 1.41 \text{ \AA}$, 四个能量范围分别为 (100—300)eV, (100—400)eV, (100—500)eV 和 (100—600)eV. 结果列于表 4 中. 图 11 是根据表 4 描绘的曲线. 我们发现第一、三 FT 峰位随 ΔE 变化较大, 第二 FT 峰位基本上保持不变, 当 $\Delta E \geq 400 \text{ eV}$, Δ_2 和 Δ_3 数值趋于稳定, 只有 Δ_1 仍有较大变化. 这些特性使 EDPD FT 成为表面结构分析的有效方法.

表 4 $C(2 \times 2)S(1s)-Ni(001)$ 的 EDPD FT 结果

FT 能量范围 (eV)	假定 S 原子到衬底各层的距离 $d_{\perp}^a(\text{\AA})$	FT 峰值位置 $d_{\perp}^a(\text{FT})(\text{\AA})$	层距修正值 $\Delta_a(\text{FT})(\text{\AA})$ $d_a(\text{FT}) - d_{\perp}^a$
100—300	$d_{\perp}^1 = 1.41$	1.37	-0.04
100—400		1.45	0.04
100—500		1.55	0.14
100—600		1.60	0.19
100—300	$d_{\perp}^1 = 1.41 + 1.76 = 3.17$	3.20	0.03
100—400		3.22	0.05
100—500		3.21	0.04
100—600		3.20	0.03
100—300	$d_{\perp}^1 = 1.41 + 2 \times 1.76 = 4.94$	4.92	-0.02
100—400		4.81	-0.13
100—500		4.79	-0.15
100—600		4.79	-0.15

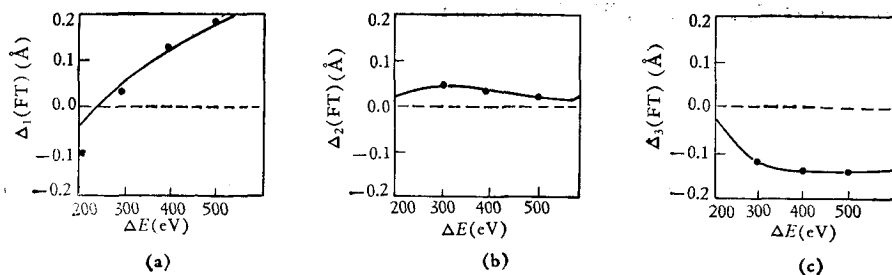


图 11 Δ_a 与 ΔE 的关系 $d_{\perp}^{S-Ni} = 1.41 \text{ \AA}$;

(a), (b), (c) 分别为第一、二、三层距修正值的变化曲线

五、结 论

1. 氧族元素 S 和 Se 吸附在 Ni(001) 衬底上形成 $P(2 \times 2)$ 和 $C(2 \times 2)$ 超结构, 当光电子从这些吸附原子的芯态发出时, EDPD FT 曲线的 FT 模值呈现一系列峰, 峰值位置与吸附原子到衬底各层之间的垂直距离相对应. 但两者之间存在确定的移动——层距修正值. 本文计算了上述各系统的各级 Δ_z 值.
2. 层距修正值 Δ_z 随 FT 能量范围改变. 当能量达到 500eV 左右, 这些特性可用以对固体表面结构直接进行分析. 作者期待新的实验结果检验我们的理论计算.

美国 Wisconsin 大学 (Milwaukee) 物理系及表面研究实验室的唐叔贤教授 (S. Y. Tong) 与作者进行过多次有益的讨论, 谨致谢忱.

参 考 文 献

- [1] Z. Hussain *et al.*, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **78** (1981), 5293.
- [2] D. H. Rosenblatt *et al.*, *Phys. Rev.*, **B23** (1981), 3828.
- [3] S. Y. Tong, J. C. Tang (唐景昌), *Phys. Rev.*, **B25** (1982), 6526.
- [4] 唐景昌、唐叔贤 (S. Y. Tong), *物理学报*, **33**(1984), 362.
- [5] D. E. Sayers *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **27**(1971), 1204.
- [6] P. A. Lee *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **53** (1981), 769.
- [7] C. H. Li *et al.*, *Phys. Rev.*, **B17** (1978), 3128.
- [8] S. Y. Tong, C. H. Li, *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* CRC Press, (1980).
- [9] S. D. Kevan P.H. D. Thesis (1980), University of California, Berkeley.
- [10] Y. Huang (黄绮) *et al.*, *Bulletin of Amer. Phys. Soc.* **27**(1982), 239.
- [11] J. C. Tang (唐景昌) *et al.*, *Bulletin of Amer. Phys. Soc.* **27** (1982), 239.
- [12] M. A. Van Hove, S. Y. Tong, *J. Vac. Sci. Technol.*, **12** (1975), 231.
- [13] S. D. Kevan *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **41** (1978), 1565.
- [14] C. H. Li, S. Y. Tong, *Phys. Rev. Lett.*, **43** (1979), 526.
- [15] S. D. Kevan *et al.*, *Phys. Rev.*, **B20** (1979), 4133.
- [16] J. E. Demuth *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **31** (1973), 540.
- [17] J. E. Demuth *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **32** (1974), 1182.
- [18] C. B. Duke *et al.*, *Nuovo Cimento*, **23B** (1974), 241.
- [19] 唐景昌, *浙江大学学报*, (2)(1984), 81.
- [20] S. Brennan *et al.*, *Phys. Rev.*, **B24** (1981), 4871.

STUDIES OF FOURIER-TRANSFORM ANALYSIS METHOD FOR ENERGY-DEPENDENT PHOTOELEC- TRON-DIFFRACTION (I)

THE SYSTEMS OF Se-Ni(001) AND S-Ni(001)

TANG JING-CHANG

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou)

* HUANG YI

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Direct Fourier-transform analysis method for energy-dependent photoelectron-diffraction curves of Se-Ni(001) and S-Ni(001) systems has been studied. The effect of different energy range in which Fourier-transformation was performed on Δ_z (layer-spacing modification) was considered. The possibility that surface structure could be determined by using these Δ_z value and FT of experimental EDPD data has been discussed.