

半导体深能级波函数在 Bloch 空间的分布特征

李名复 任尚元 茅德强

(中国科学技术大学研究生院) (中国科学技术大学物理系)

1984 年 3 月 23 日收到

提 要

在 Koster-Slater 格林函数以及中心原胞缺陷势近似的基础上第一次给出并讨论了 Si, GaAs, GaP 深能级波函数在 Bloch 空间的分布特征. 并指出, 对于一定能带数目的近似晶体模型, 计算深能级波函数的收敛性比计算深能级能量的收敛性要快.

一、方 法

在文献[1—4]中, 我们对半导体中短程缺陷势引入的深能级波函数在实空间的分布特征进行了系统的研究, 和其他基于 Koster-Slater 格林函数方法的计算作比较^[5-7], 我们采用了中心原胞缺陷势(central cell defect potential, 简称为 CCDP, 下同)近似^[8]. 计算的结果与现有的大部分 EPR 实验^[9-12]以及目前较为可靠的自洽势理论^[5,6]符合得比较好. CCDP 近似的优点不仅在于用少得多的计算机时能得到比较好的结果, 而且可以获得一系列简单的解析关系用以讨论其它方法至今难以计算的问题. 例如, 在文献[13]中讨论了深能级的压力系数, 在文献[14]中讨论了深能级在浅能区的波函数行为, 在文献[15]中讨论了缺陷对. 在本文中, 我们将给出文献[1,2]所算得的 A_1 态深能级波函数以及文献[3,4]所算得的 T_2 态深能级波函数在 Bloch 空间的分布特征. 这个问题虽然有一定意义, 但过去并未有人讨论过.

我们的中心议题是: 对于一定的晶体和一定的深能级能量 E , 其波函数 ψ 在各个 Bloch 能带(能带指数 n)的分布几率如何? 在这里, 我们将 Vogl 等人^[4,6]的晶体模型中的十个能带按能量大小顺次记 $n = 1, 2, \dots, 10$. 将整个 Bloch 空间 $[n, \mathbf{k}]$ 分成十个子空间, 第 n 个子空间由第 n 个 Bloch 能带组成. 利用 CCDP 近似, 可以证明波函数在第 n 个子空间的占据几率为

$$P^{(n)} = \frac{\partial G_{l00}^{(n)}}{\partial E} / \frac{\partial G_{l00}}{\partial E}, \quad (1)$$

其中格林函数 G 矩阵元

$$G_{l00} = \langle l, 0, 1 | \hat{G} | l, 0, 1 \rangle, \quad (2)$$

$$G_{l00}^{(n)} = \langle l, 0, 1 | \hat{R}^{(n)} \hat{G} | l, 0, 1 \rangle, \quad (3)$$

波函数 $|l, 0, 1\rangle$ 的意义见文献[1—4], l 为深能级波函数对称性标志. 当 l 为 A_1 对称

时, $|l, 0, 1\rangle$ 即原子 S 轨道; 当 l 为 T_2 对称时, $|l, 0, 1\rangle$ 即为原子 P 轨道. $\hat{R}^{(n)}$ 为子空间 n 的投影算符,

$$\hat{R}^{(n)} = \sum_{\substack{k \\ \rightarrow \text{B. Z.}}} |nk\rangle\langle nk|. \quad (4)$$

二、结果和讨论

利用(1)式以及文献 [1—4] 所得到的格林函数矩阵元数值, 可以直截了当地得到 ψ 在 Bloch 空间的分布几率. 对三种最重要的半导体 Si, GaAs 以及 GaP 的 A_1 态和 T_2 态

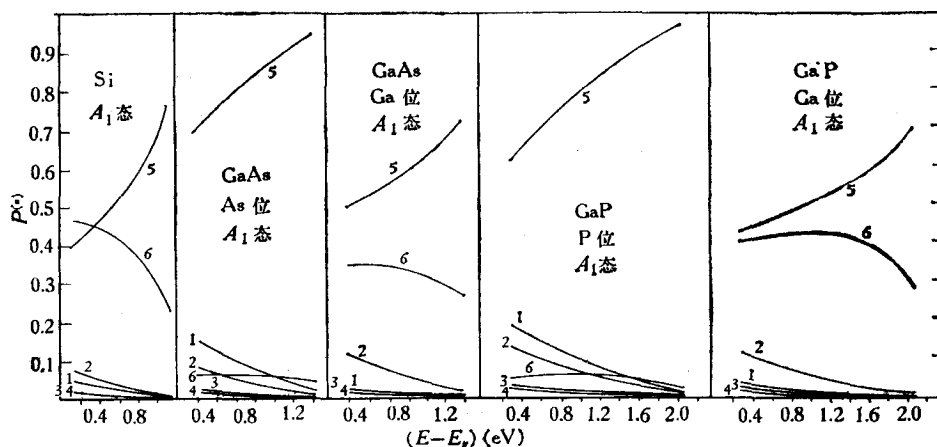


图 1 A_1 对称深能级波函数在 Bloch 空间的分布
 $n = 1-4$ 为价带; 5-10 为导带; 几率过于小的带未在图中画出

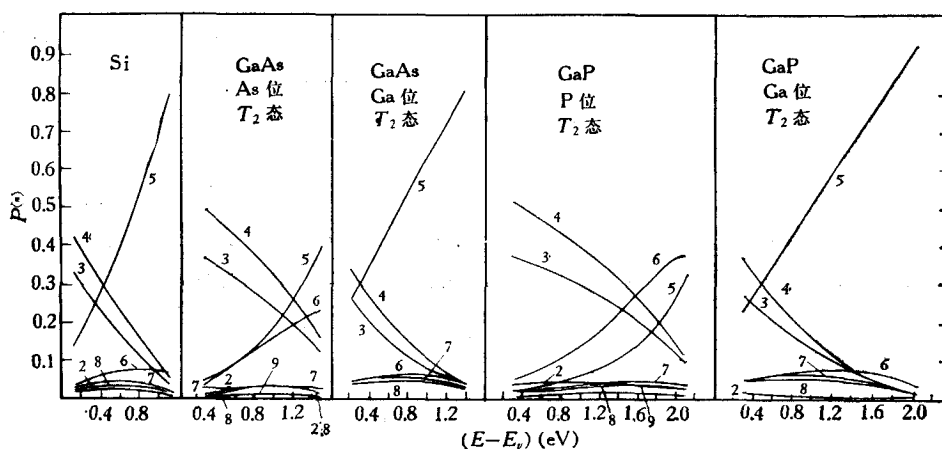


图 2 T_2 对称深能级波函数在 Bloch 空间的分部图注同图 1

深能级作了计算, 结果列于图 1 和图 2. 下面对所得结果作几点讨论:

1. A_1 对称深能级 对于 GaAs 和 GaP 当缺陷势位于五族位 (P 或 As 位) 时, 波函数

主要贡献在最低导带 $n = 5$ 。例如对 GaAs, 在大部分能量范围以内 $P^{(5)}$ 大约为 70—95%。对于 Si 以及 GaAs 和 GaP 当缺陷势位于三族位 (Ga 位) 时, 波函数贡献主要为最低两个导带 $n = 5, 6$ 。在任何情况下, 波函数在价带的占据几率都极小。即使能量 E 很靠近价带顶的情况亦如此。由下面第 4 点的分析可知, 这是因为价带顶附近虽然权重因子 $(E - E')^{-2}$ 很大, 但 A_1 对称部分态密度为零。

2. T_2 对称深能级 对于 Si 以及 GaAs 和 GaP 当缺陷势位于三族位 (Ga 位) 时, 当能量 E 在禁带上半部时, 波函数主要贡献来自最低导带 $n = 5$; 当能量 E 在禁带下半部时, 波函数主要贡献来自 $n = 3, 4, 5$ 带。就是说, 两个最高价带也起很大作用。对于 GaP 和 GaAs 且缺陷势位于五族位, 有四个带 $n = 3, 4, 5, 6$ 起主要贡献。

3. 本文结果有助于讨论用有限个能带计算波函数的收敛性问题。对于所有情况, 高能导带 $n = 7, 8, 9, 10$ 对波函数贡献极微, 因此在 Vogl 模型中用六个导带应可预期得到收敛足够好的结果。也可以探讨进一步简化能带模型的问题。例如对于 GaAs 缺陷势位于 As 位时的 A_1 对称态, 在能量 $E - E_v$ 大于 1.0eV 时 $P^{(5)}$ 大于 90%。因此可以预期在此能量范围内, 仅仅用最低导带 $n = 5$ 一个能带来讨论波函数, 就可获得大致合理的结果。图 3 和图 4 列出

$$E - E_v = 1.2\text{eV}$$

时分别用十个带和 $n = 5$ 一个带所获得的波函数特征。图 3 为波函数占据几率 P^R 和第 R 壳层格点的关系。其中 P^R 定义为

$$P^R = \sum_m |\langle A_1, R, m | \psi \rangle|^2, \quad (5)$$

m 标志各种不可约表示。图 4 为波函数在第 R 壳层某格点的值 $\psi(\mathbf{r}_R)$ 和 R 的关系。由图 3 和图 4 可知, 仅用 $n = 5$ 一个带算得的波函数特征, 在各方面都与用十个带算得的结果大致相符。仅仅在缺陷位 $r = 0$ 的波函数值 $\psi(0)$ 有较大的误差。

4. 由 (1) 式可知

$$P^{(n)} \propto \frac{\partial G^{(n)}}{\partial E} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle l, 0, 1 | \rho^{(n)}(E') | l, 0, 1 \rangle}{(E - E')^2} dE', \quad (6)$$

其中 $\rho^{(n)}(E')$ 为第 n 个能带对应的态密度。(6) 式说明波函数在第 n 个能带的占据几率决定于该能带与 ψ 对称性匹配的部分态密度以 $(E - E')^{-2}$ 为权重的平均值。

将决定波函数在 Bloch 空间分布的 (1), (6) 式与决定深能级能量 E 值的下列公式相比^[1-4]:

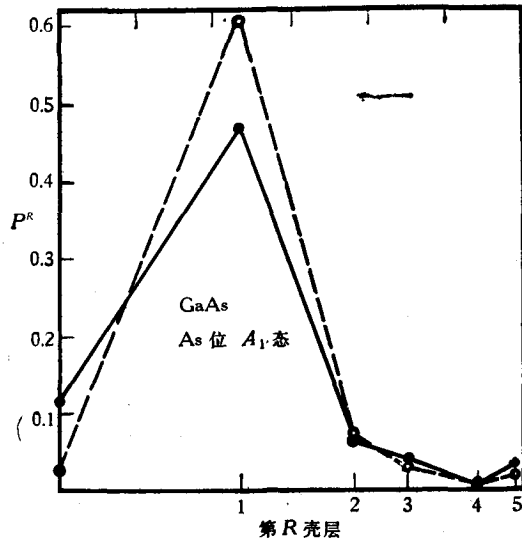


图 3 分别用 $n = 5$ 一个带(实线)和十个带(虚线)计算波函数在第 R 壳层的占据几率 P^R

$$\left(\sum_{\text{价带对应的 } n} + \sum_{\text{导带对应的 } n} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle l, 0, 1 | \rho^n(E') | l, 0, 1 \rangle}{E - E'} dE' = G(E) = V_l^{-1} \quad (7)$$

可以看出深能级能量决定于 $G(E)$, 而深能级波函数在 Bloch 空间分布决定于 $\partial G/\partial E$. 前者对于基质晶体能带结构准确性的要求高得多. 这有两方面的因素. 第一方面: 对比 (6), (7) 式可知, 第 n 个带对波函数的贡献具有 $(E - E')^{-2}$ 因子, 而对决定能量的 $G(E)$ 的贡献具有因子 $(E - E')^{-1}$. 因此, 前者对于远离禁带的诸带收敛得更快. Singh 等人^[17] 曾批评目前一些 Koster-Slater 格林函数方法的计算对基质晶体所用的能带数目不够多. 他们的具体计算指出, 当能带数目增加到 40 个时, 对应的深能级能量才趋于收敛. 本文的分析指出, 应区分能量和波函数的计算. 对于波函数的计算可以用较少的能带. 第二方面, 由 (2) 式知, $G(E)$ 的贡献为导带和价带两部分符号相反的贡献的代数和. 在深能级的很多情况, 这两部分的绝对值很相近, 而其代数和为一小量. 表 1 列出 GaP 中 P 位 A_1 缺陷态 $E = 1.2\text{eV}$ 时对应的十个

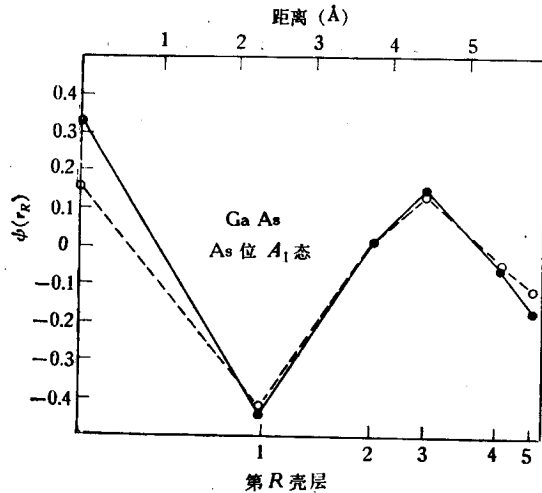


图 4 分别用 $n=5$ 一个带(实线)和十个带(虚线)计算波函数在第 R 壳层格点的值 $\psi(r_R)$

上式说明某个能带的局部误差将导致总的 G 值的很大变化, 从而对决定能量 E 有很大影响. 反之, 决定波函数在 Bloch 空间分布几率的 (1), (6) 式, 被积函数永远是正值, 各部分的贡献相加而并不相消. 能带的局部误差只引起结果的局部变化.

表 1

$G^{(1)}$	$G^{(2)}$	$G^{(3)}$	$G^{(4)}$	$G^{(5)}$	$G^{(6)}$	$G^{(7)}$	$G^{(8)}$	$G^{(9)}$	$G^{(10)}$
0.06039	0.01816	0.00106	0.00044	-0.07825	-0.00660	-0.00003	-0.00002	-0.00052	-0.00078

作者感谢吴孝慎、韩一琴同志在整理手稿中给予的帮助.

参 考 文 献

- [1] Shang-yuan Ren, Wei-min Hu, O. F. Sankey and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, B26 (1982), 951.
- [2] 任尚元, 中国科学(A辑), (1984), 92.
- [3] 李名复, 任尚元, 茅德强, 物理学报, 32(1983), 1263.
- [4] Ming-fu Li, De-qiang Mao and Shang-yuan Ren, *Solid State Comm.*, 48 (1983), 789.
- [5] J. Bernholc, N. O. Lipari and S. T. Pantelides, *Phys. Rev. Lett.*, 41 (1978), 895; *Phys. Rev.*, B21

- (1980), 3545;
J. Bernholc, N. O. Lipari, S. T. Pantelides and M. Scheffler, *Phys. Rev.*, **B26** (1982), 5706.
- [6] G. A. Baraff and M. Schluter, *Phys. Rev. Lett.*, **41** (1978), 891; *Phys. Rev.*, **B19** (1979), 4965.
- [7] M. Jaros, *Adv. in Phys.*, **29** (1980), 409;
M. Jaros, *Deep levels in semiconductors*, Adam Hilger Ltd, Bristol, (1982).
- [8] H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford and J. D. Dow, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 810.
- [9] G. W. Ludwig, *Phys. Rev.*, **137** (1965), A1520.
- [10] H. G. Grimmeis, E. Janzen, H. Ennen, O. Schirmer, J. Schneider, R. Worner, C. Holm, E. Sirtl and P. Wagner, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 4571.
- [11] J. Schneider and U. Kaufman, *Defect and Radiation Effects in Semiconductors*, (1980), Inst. Phys. Conf. Ser. no. 59, (1981), 55.
- [12] R. J. Wagner, J. J. Krebs, G. H. Stauss and A. M. White, *Solid State Comm.*, **36** (1980), 15.
- [13] Shang-yuan Ren, J. D. Dow and D. J. Wolford, *Phys. Rev.*, **B25** (1982), 7661.
- [14] 李名复、任尚元、茅德强, *物理学报*, **33** (1984), 738.
- [15] 茅德强、李名复、任尚元, *物理学报*, 待发表.
- [16] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**(1983), 365.
- [17] V. A. Singh, U. Lindefelt and A. Zunger, *Phys. Rev.*, **B25** (1982), 2781.

DISTRIBUTION CHARACTERISTICS OF DEEP LEVEL WAVEFUNCTIONS IN BLOCH SPACE

LI MING-FU

(Graduate School, University of Science and Technology of China, Beijing)

REN SHANG-YUAN MAO DE-QIANG

(Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei)

ABSTRACT

A simple method in the framework of Koster-Slater Green's function calculation and central cell defect potential (CCDP) approximation is used to calculate the distribution of deep level wavefunctions in Bloch space for Si, GaAs and GaP for the first time. Convergence properties are discussed. It is shown that for definite number of energy bands in the host crystal model, the convergence of deep level wavefunction calculations is faster than that of deep energy calculations.

H 在 Al(111) 面上吸附的多重散射 X_α 自洽计算*

田曾举 黄 绮 张开明

(复旦大学现代物理研究所) (中国科学院物理研究所) (复旦大学现代物理研究所)

1984年4月10日收到

提 要

利用多重散射 X_α 自洽场方法研究了H在 Al(111) 表面吸附的桥位和顶位模型。结果表明顶位吸附的结合能优于桥位。顶位吸附中H的 $1s$ 电子与Al相互作用形成不同形式的 σ 键，本文分析了这些成键细节，并给出了顶位吸附的态密度。

一、引 言

关于H在 Al(111) 表面的吸附问题，已经有过一些理论计算^[1,2]。Hjelmberg^[1] 利用胶体 (jellium) 模型做了 H/Al(111) 定域密度泛函的自洽计算，结果表明H在 Al(111) 顶位和桥位吸附稍优于开位和选位吸附。在文献[2]中利用有限集团的电荷自洽 EHT 方法，对H在 Al(111) 表面的不同几何构型上的吸附进行了研究，也得到与文献[1]相同的结论，并且以顶位吸附最稳定。为了弄清这种稳定结构的分子轨道特性，本文利用自洽的 X_α 散射波方法，对顶位和桥位模型进行了计算，仔细分析了稳定构型中化学成键的细节，得到H在 Al(111) 顶位上与Al形成不同形式的 σ 键的结果。

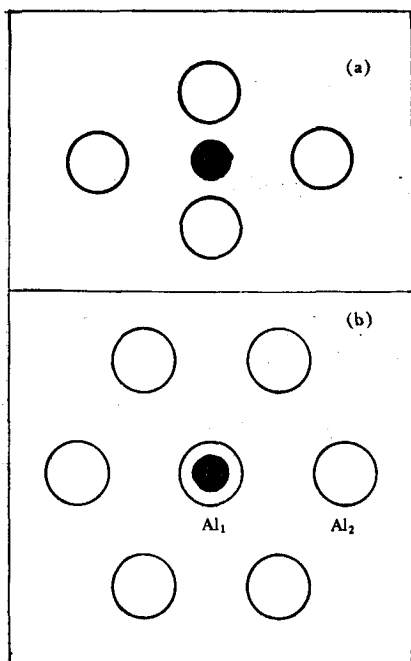


图1 吸附模型图
(a) 桥位; (b) 顶位;
○ 表示 Al; ● 表示 H

二、方法和模型

本文应用多重散射 X_α 自洽场 (SW- X_α -SCF) 方法进行计算^[3-5]。考虑到固体表面吸附的具体情况，采用交迭球的模型^[6-8]。

为了便于同文献[2]的结果比较，本文选取与文献[2]同样的桥位和顶位模型，见图1。允许

* 中国科学院科学基金资助的课题。

H 球与 Al 球有一定的交迭。计算中采用参量列于表 1, 其中距离用原子单位 (au) 表示。

表 1 计算参量

原子球半径	$r_{\text{Al}} = 2.701, r_{\text{H}} = 1.0, R(\text{Al-Al}) = 5.402$
交换参量 α	$\alpha_{\text{Al}} = 0.72853, \alpha_{\text{H}} = 0.97804, \alpha_{\text{球间}} = \alpha_{\text{外球}} = \frac{0.77843}{0.75976}$

其中交换参量 α 的选取来自文献[10], 外球区的 α 是取各原子球的权重平均, 久期行列式中的 l 值可取 $l_{\text{max}}^{\text{外球}} = 3, l_{\text{max}}^{\text{H}} = l_{\text{max}}^{\text{Al}} = 1$ 。我们对于 H 和 Al 取 $l_{\text{max}} = 3$ 的情况也作了计算, 所得结果与上述取法的基本一致, 而机器运算时间要增加很多, 故为节约机时取

$$l_{\text{max}}^{\text{H}} = l_{\text{max}}^{\text{Al}} = 1$$

就可以了。

三、结果和讨论

原子吸附在表面的结合能定义为

$$\Delta E = E_{\text{tot}} - E_{\text{surf}} - E_{\text{H}}. \quad (1)$$

上式中 E_{tot} 代表吸附体系的总能量, E_{surf} 代表清洁表面的总能量, E_{H} 代表 H 的总能量。

H 在两种构型的最佳吸附位置由总能量极小来决定。这些结果列于表 2。从表 2 中可知, 两种构型中以顶位较优, H 与 Al 表面的距离在顶位及桥位分别为 3.0au 和 1.45au。为了比较, 表 2 中还列出了其它文献中的结果。

表 2 中 d_{\perp} (au 单位) 表示 H 到 Al 表面的距离, $-\Delta E$ 为结合能 (Rydberg 单位)。

表 1

		文献 [1]	文献 [2]	本文计算结果
桥 位	d_{\perp}	2.0	0.7	1.45
	$-\Delta E$	0.14	0.468	0.207
	$-2T/V$			1.00107
顶 位	d_{\perp}	2.9	2.3	3.0
	$-\Delta E$	0.14	0.479	0.235
	$-2T/V$			1.00092

用胶体模型^[1]分辨不出顶位吸附和桥位吸附的能量差别, 用 EHT 方法^[2]得到的结合能又太大, 这是 EHT 方法的一个弱点。本文计算的结合能比文献[2]中 EHT 的计算结果要合理一些。另一方面, 我们还可以用是否满足维里定理来检验采用交迭球的合理性。为避免交迭过大, 在顶位和桥位中 Al 原子球半径取作 2.651au, 此时总能量中动能 T 和势能 V 是满足维里定理的, 表 2 中列出当 Al₁ 半径取 2.651au 时维里定理的满足情况。计算还表明若将 Al₁ 原子球半径取为 2.701au (此时 H 和 Al₁ 的交迭最大) 维里定理也是满足的。

本文还作了吸附态密度的计算, 局域在第 p 原子球的第 l 分波定域态密度为^[8]

$$N_p(\mathcal{E}, l) = \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{2\pi\sigma}} Q_p(l, i) \exp\left(-\frac{(\mathcal{E} - \mathcal{E}_i)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2)$$

其中 \mathcal{E}_i 为轨道本征值, n_i 为轨道电子占有数, σ 为轨道高斯展宽, 通常取 $\sigma = 0.3\text{eV}$, $Q_p(l, i)$ 为第 i 分子轨道中局域在 p 原子上的分波电荷, 可由下式计算:

$$Q_p(l, i) = \sum_m 4\pi [C_{lm}^p]^2 \int_0^{b_p} [R_l^p(r)]^2 r^2 dr, \quad (3)$$

式中 C_{lm}^p 为由计算得出的 p 原子球内对应于本征值 \mathcal{E}_i 的波函数展开系数, b_p 为 p 原子球半径, $R_l^p(r)$ 为波函数的分波径向函数. 局域在 p 原子上的态密度 (LDOS) 即为各分波定域态密度之和,

$$N_p(\mathcal{E}) = \sum_l N_p(\mathcal{E}, l). \quad (4)$$

图 2 给出了顶位模型的能级分布, 按此模型所属 C_{6v} 点群对称性, 标出了各个态所属不可约表示. 从图 2 中清楚地看出, 吸附以后能级向下移动. 在图 3 中给出了利用 (4) 式求出的顶位模型吸附 H 的定域态密度. 图 3 中 H 原子吸附位置为 $(0, 0, 3.0\text{au})$. 从波函数分析可以知道, H 与最近邻 Al_1 发生了较强相互作用. 这些相互作用态分别对应于图 3 的四个峰, 这四个峰所对应的态都属于 a_1 不可约表示. 图 3(a) 中各个峰几乎全是 H

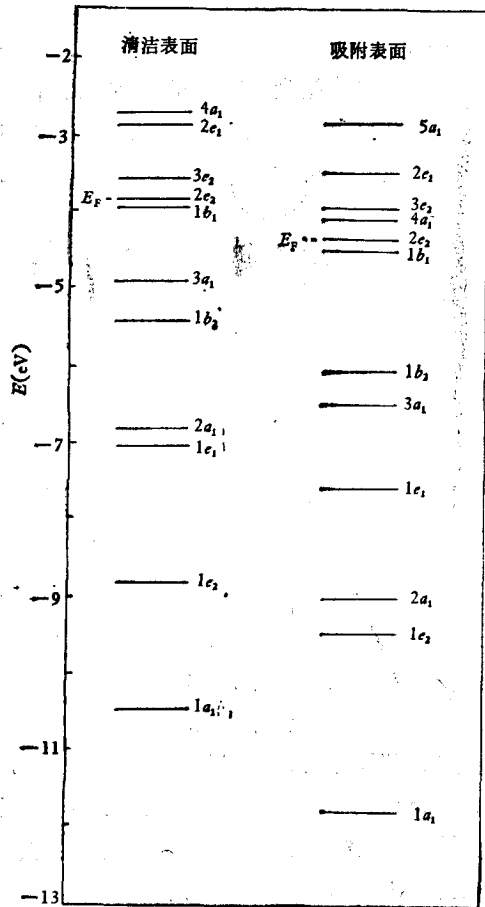


图 2 顶位清洁表面和吸附表面能级图
H 的位置为 $(0, 0, 3.0\text{au})$

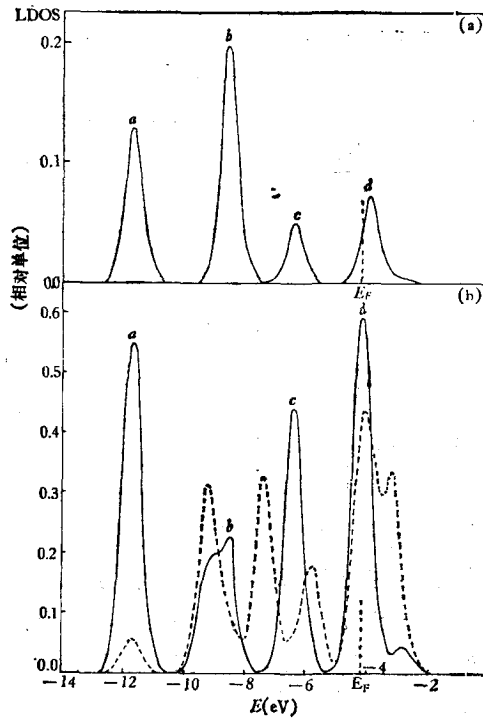


图 3

- (a) H 的定域态密度
H 坐标为 $(0, 0, 3.0\text{au})$;
- (b) Al 的定域态密度
实线为 Al_1 ; 虚线为 Al_2

的 1s 分波贡献, p 分波贡献甚微. 图 3(b) 中实线为 Al₁ 的定域态密度, 其中 *a* 峰主要是 Al₁ 的 3s 分波, 也含有少量 p 分波的贡献, *b* 峰和 *d* 峰主要是 3p 分波的贡献, 含有少量 3s 分波的贡献, *c* 峰中是 Al₁ 的 3s 和 3p 杂化轨道的贡献. 从图 3(a) 和 (b) 可以看出, H 和 Al 的相互作用情况. *a* 峰和 *b* 峰是 H 和 Al₁ 的成键峰, *d* 是反键峰, 下面还将给出对应于 *a* 峰和 *d* 峰的态的波函数空间分布图. 从图 3 的相对标尺中也可看出 H 和 Al₁ 在 *a*, *b*, *c*, *d* 四个峰中所占的相对比例. 作为比较, 图 3(b) 中还用虚线画出了与 H 次近邻的 Al₂ 的定域态密度, 可以看出 Al₂ 与 H 的相互作用很小. 图 3(b) 中 -5eV 以下的态密度主要是 Al₂ 3s 电子的贡献, -5eV 以上则主要是 3p 电子的贡献. E_F 位于 -4.13eV, 处在 3p 态密度峰中, 在这个峰中电子填充了很少一部分, 这个情况与 Al 只有一个 3p 电子的图象很类似. 这说明顶位模型中 H 与 Al 的相互作用是很定域的, 主要反映在 H 和 Al₁ 之间, 这种较强的相互作用使得 Al₁ 的 3p 能级分裂, 有一部分 3p 电子的状态由 E_F 附近深入到 E_F 以下较深位置(图 3(b) 中 *b* 峰).

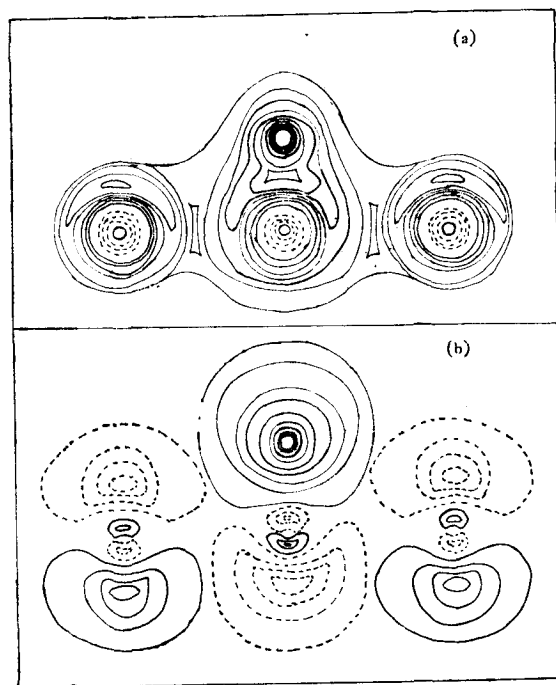


图 4

(a) 1a₁ 态波函数图; (b) 4a₁ 态波函数图

在 H 与 Al₁ 的相互作用态中, 表现出不同的成键特性. 价电子能量最低态 1a₁ 中, H 的 1s 电子与 Al 的 3s 电子相互作用产生较强的 σ 键, Al₂ 的少部分 3s 电子也参与成键, 从而形成了这种最稳定状态. 在 2a₁ 态中, H 的 1s 电子与 Al₁ 的 3p_z 轨道产生了较强的相互作用, 而 Al₂ 则呈现 3s 轨道特性, H 与 Al₁ 的成键使得一部分 3p 电子占据到 E_F 以下较深的能级状态. 3a₁ 状态则是 H 的 1s 电子与表面 Al₁ 的 s-p 杂化轨道相互作用引起的, 在这个态中次近邻的 Al₂ 也显出 s-p 杂化轨道特性, 由 H 的 LDOS 可以看出, H 的 1s 电子对

这个态的贡献不是很大。空态 $4a_1$ 是典型的 H 的 $1s$ 电子与 Al_1 的 $3p_z$ 反键态, Al_2 在这个态中也显示 P 特性。为了清楚表达 H 与 Al 的相互作用, 图 4 中给出了 $1a_1$ (对应 a 峰) 和 $4a_1$ (对应 d 峰) 两个状态波函数空间分布图, 图中的平面是由 H- Al_1 - Al_2 三点构成的截面, 实线和虚线表示波函数的符号相反。图 4 中形象地表现了 $1a_1$ 中 H 与 Al_1 的 $3s$ 轨道和 $4a_1$ 态中 H 与 Al_1 的 $3p_z$ 轨道的相互作用。注意到两个分布图中的 Al_2 周围的情况可以发现, H 仅与 Al_1 之间有较强的相互作用, 这再一次说明了成键的定域特性。

由上面的讨论可以看出, H 与 Al(111) 表面的相互作用是比较复杂的, 仅把表面看成是 s 衬底或 p 衬底是不够的。用胶体模型只能作出较粗的定性分析。而多重散射 X_α 方法关于表面吸附的计算对表面化学键合情况有较详细的描述, 可以得到比 EHT 方法更多的信息。此外, 用 X_α 方法得到的吸附能的数据也比 EHT 更为合理。但是, 由于 muffin-tin 近似的限制, 顶位吸附的距离不能小于 Al 原子球的半径, 否则 H 将进入 Al 的 muffin-tin 球, 这是不合理的。本文得到的顶位稳定位置 $d_{\perp} = 3.0\text{au}$ 大于 EHT 计算的结果^[2], 可能就是这个缘故。

作者对中国科学院物理研究所提供的计算条件表示感谢。

参 考 文 献

- [1] H. Hjelmberg, *Surf. Sci.*, **81** (1979), 539.
- [2] 徐永年、张开明, *物理学报*, **32** (1983), 911.
- [3] K. H. Johnson, *J. Chem. Phys.*, **45**(1966), 3085.
- [4] J. C. Slater, K. H. Johnson, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 844.
- [5] K. H. Johnson, *Advan. Quantum Chem.*, **7**(1973), 143.
- [6] N. Rosch, D. Meuzd, *Chem. Phys.*, **13**(1976), 243.
- [7] I P. Butra, R. Baux, *Surf. Sci.*, **49**(1975), 653.
- [8] N. Rosch, in: *Electrons in Finite and Infinite Structures*, eds, p. Phariseau and L. Scheire, Plenum Press, New York, (1977), p. 1.
- [9] F. Herman, A. R. Williams, K. H. Johnson, *J. Chem. Phys.*, **61**(1974), 3508.
- [10] K. Schwarz, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 2466.

SW - X_α -SCF METHOD CALCULATION FOR HYDROGEN CHEMISORPTION ON Al(111) SURFACE

TIAN ZENG-JU

(Institute of Modern Physics, Fudan University)

HUANG YI

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ZHANG KAI-MING

(Institute of Modern Physics, Fudan University)

ABSTRACT

The chemisorptions for H/Al(111) with bridge site and top site models are studied by SCF- X_α scattered wave method. It is shown that the binding energy for the top site model is more favorable to that for the bridge model. In the case of top site chemisorption, the bonding properties between the adatom H and the substrate are discussed in some detail.