

Si(111)7×7 结构模型的稳定性研究*

刘惠周 李哲吟

中山大学物理系

1988 年 9 月 12 日收到

本文基于有相互作用的结构件的概念,对 Si(111)7×7 结构模型的稳定性进行研究.利用紧束缚法,计算了各种结构件的形成功能及其相互作用能.由这些结构件可灵活地构成各种大单胞的表面结构并对其进行总能计算,而避免了大工作量的计算.对 Si(111)5×5 和 7×7 DAS 模型,我们得到其表面能分别为 -0.467 eV 和 -0.477 eV,与 Qian 和 Chadi^[8]的结果很接近.并指出, Harrison^[16]提出的 7×7 吸附原子模型和 Binnig 等人^[2]提出的 7×7 吸附原子-空位模型都是不稳定的.

一、引 言

自从 1959 年 Schlier 和 Fransworth^[1]发现 Si(111) 表面具有 7×7 结构,该结构便成为表面物理学中最引人注目的问题之一. Si(111)7×7 结构的基本问题可归结为两个:一个是 Si 表面上原子的几何排布,即表面结晶学问题;另一个是导致 7×7 这样巨大单胞结构的原因,即再构的推动力及结构的稳定性问题.近年来, Si(111)7×7 结晶学已得到迅猛的进展.1983 年 Binnig 等人^[2]利用他们发明的扫描隧道显微镜,观察到每个 7×7 单胞内含有 12 个小丘和在角上有一个深洞.而在此前后,McRae 等人^[3]从低能电子衍射实验中及其后在离子背散射实验中^[4]推断出 7×7 单胞内有一半区域发生了堆积层错,在层错三角区与无层错三角区的畴界上导致 9 对二聚体(dimer)和一个深洞在畴界交截处.1985 年, Takayangi 等人^[5,6]根据透射电子衍射和透射电子显微镜的实验数据,提出了 DAS 模型,它是二聚体-吸附原子-层错(dimer-atom-stacking fault)模型的简称. DAS 模型已得到多方面实验的支持,广为人们所接受.

自 DAS 模型提出并为多方面实验证实后,研究导致 Si(111) 表面的稳定结构为 7×7 的原因,便自然成为人们所关注的问题. Northrup^[7]利用第一原理赝势方法和局域密度泛函近似对 Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 的吸附原子模型进行了研究,证明了 Si 吸附原子应吸附于具有 4 配位的顶位上,从而说明了 DAS 模型中吸附原子位于顶位的合理性. Qian 和 Chadi^[8]利用 Keating 方法计算了 DAS 模型的总能,其后又用紧束缚法计算了 DAS 模型的总能^[9],结果表明,7×7 DAS 模型的总能最低,最为稳定. Vanderbilt^[10]利用结构件的概念,进一步研究了二聚体在 Si(111)7×7 再构中所起的作用,但他没有充分考虑结构件之间的相互作用.

* 国家自然科学基金资助的课题.

对于大单胞表面的稳定性研究,计算工作量大是主要困难之一。

本文基于有相互作用的结构件的概念,对 Si(111) 7×7 结构的稳定性作了系统的研究。利用紧束缚法,计算了各种结构件的形成功能及其相互作用能。在这一基础上,研究了各种大单胞表面的总能及其稳定性。我们所得到的结果,比文献 [10] 在定性上和定量上更为可信。而采用结构件的概念,便于组成各种模型,因而它比文献 [9] 的计算工作量大为减小,而所得到的总能与文献 [9] 很接近。除了 DAS 模型外,我们还研究了 Harrison^[11] 的吸附原子模型和 Binnig 等人^[12] 的吸附原子-空位模型及其它一些模型。结果表明, 7×7 DAS 模型最为稳定,而 7×7 吸附原子模型和 7×7 吸附原子-空位模型都不稳定。

二、结构件与总能公式

在一个大单胞超晶格结构中,常可把它看作由若干个结构件组成。例如,在 7×7 DAS 模型中^[6],可把它看作由“吸附原子件”,“残留原子件”,“二聚体件”,“空位件”和“层错件”所组成。每个结构件包含若干个原子。在第三部分中我们将会看到,并不需要(也不可能)把衬底原子明确地划归给各个结构件。因为结构件是较小的结构单元,它允许我们用准确的方法去计算结构件的形成功能。我们定义结构件的形成功能为由单一种结构件组成的表面经充分弛豫后的总能与构成这个表面的原子处于参考状态的总能之差。参考状态可有不同的选择,我们将选用大块晶体的体内状态为参考状态。由两种结构件组成的表面,其原胞一般仍较小,它仍允许我们用准确的方法计算这种表面的能量,因此可准确地得到两种结构件的相互作用能。因此,我们所定义的结构件的概念,不仅允许我们准确地计及结构件内部的各种近程相互作用及结构件之间的近程相互作用,而且由于周期性,亦已计及它们之间的远程相互作用。当由结构件构成新的结构时,将出现新的相互作用。我们假定,较远距离的结构件不影响最近邻结构件之间的相互作用。我们也就是在这样意义下引用“最近邻作用近似”这一术语的。强调这一点是因为当我们用这一术语时,并不是意味着把远程作用统统忽略掉。因此,可以预期在最近邻作用近似下,仍能保持较高的准确性。

设在 $M \times N$ 超晶格结构中,每个单胞内含有 n_i 个第 i 种结构件,其形成功能为 E_i ,并有 $m_{ij,k}$ 对在第 k 类几何配置下 i 结构件与 j 结构件的相互作用 $V_{ij,k}$,则在最近邻作用近似下,我们定义这种超晶格结构的表面能为

$$E = \sum_i n_i E_i + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} m_{ij,k} V_{ij,k}. \quad (1)$$

而每 1×1 单胞面积的这种结构的表面能与未弛豫的理想表面的表面能之差为

$$\Delta E = \left(\sum_i n_i E_i + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} m_{ij,k} V_{ij,k} \right) / (M \times N) - E_{ideal}. \quad (2)$$

其中 E_{ideal} 为未弛豫的理想表面的表面能。我们称 ΔE 为相对表面能。 ΔE 愈负,表示此结构愈稳定。

三、结构件的形成能及其相互作用能的计算方法与结果

上面已提到,我们定义每个单胞只含一个结构件的表面的形成能为该结构件的形成能,而由两种结构件 1 和 2 组成的表面(每个单胞只含一个结构件 1 和一个结构件 2)的形成能 E ,与两种结构件的形成能 E_1 和 E_2 之差为两个结构件的总相互作用能,即

$$E = E_1 + E_2 + m_{12}V_{12}.$$

其中 m_{12} 为最近邻数。我们定义 E_2^* 为

$$E_2^* = E_2 + m_{12}V_{12} = E - E_1. \quad (3)$$

它把两个结构件的相互作用能归并到结构件 2 上,它表示在周围配置结构件 1 的环境下,形成结构件 2 所需的能量。我们称它为结构件 2 的有效形成能。同理,如果表面存在互为最近邻的三种结构件,则结构件 3 的有效形成能为 $E_3^* = E_3 + m_{13}V_{13} + m_{23}V_{23}$,等等。利用有效形成能,(2)式可改写为

$$\Delta E = \left(\sum_i n_i E_i^* \right) / (M \times N) - E_{ideal}. \quad (4)$$

(3)和(4)式为本文计算的基本公式。

本文采用参数化紧束缚法^[9,11,12]对 7 层薄片模型计算 Si(111)表面上各种结构件的有效形成能 E_i^* 。薄片的背面用哑 Si 原子饱和 Si 的悬挂键。在计算过程中让 4 个原子层进行弛豫。原子的弛豫由 Hellmann-Feynman 力决定。整个计算程序是我们自己编写的,经多种计算核验无误^[12]。采用 Chadi 关于 Si 的紧束缚参数^[9,11],但其中 U_0, U_1, U_2, U_0^H 和 U_0^L 的值稍有修改,分别为

$$U_0 = 4.126, U_1 = -16.283, U_2 = 55.890, \\ U_0^H = 3.836, U_0^L = 2.607.$$

下面分别讨论对各个结构件的计算结果。

1. Si(111)1×1 未弛豫的理想表面模型 得到 Si(111)未弛豫的理想表面的形成能 $E_{ideal} = 1.42$ eV,与 Northrup^[13]的结果 1.46 eV 相接近。它是一个金属性表面,表面能带向下色散,能带中心在 -0.07 eV 处(以价带顶能量为零点,以下同)。

2. Si(111)1×1 堆积层错模型 由此模型得到每个层错原子的形成能为 1.45 eV,即每个层错原子比理想表面原子附加一个能量 $E_{st} = 0.03$ eV,与文献[8]所引用的数据 0.04 eV 相接近。它是一个金属性表面,表面能带向下色散,中心在 -0.03 eV 处。

3. Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 顶位吸附原子模型 图 1 给出该模型的顶视图。吸附原子位于第二层原子 5 的上方,吸附原子的配位数为 4。它的形成能 $E_a = 3.42$ eV,此即为吸附原子件的形成能。在价带顶附近有 3 个表面带,其中心分别为 0.63 eV, -1.05 eV, -1.16 eV,前一个带向下色散,后两个带向上色散。与第一性原理赝势方法计算的结果^[7]符合得相当好。如果假定文献[7]中的 Fermi 能量 E_F 位于价带顶之上 0.6 eV 处(此为实验值^[9]),则我们得到的表面带中心只比文献[7]向上平移 0.1 eV 左右,这多少增强了我们用参数化紧束缚法研究顶位吸附原子模型的信心。

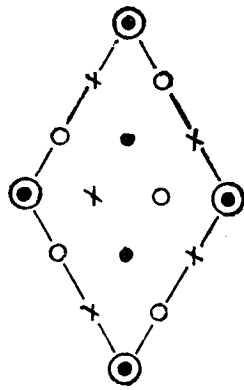


图1 Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 吸附原子模型的单胞(未弛豫) ◎ 为吸附原子; ○ 为第一层原子; ● 为第二、三层原子; × 为第四、五层原子

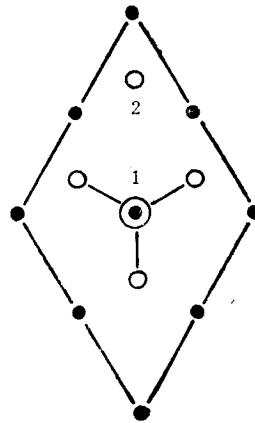


图2 Si(111) 2×2 吸附原子模型的单胞(未弛豫) 符号意义同图1

4. Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 顶位吸附原子-层错模型 把图1中第一层原子的位置改变放置在“×”位上面,便为本模型。由本模型算得的形成能 $E = 3.48 \text{ eV}$ 。由(3)式,得每个层错原子的有效附加能量 $E_{af}^* = 0.02 \text{ eV}$ 。因为在第二个模型已算得 $E_{af} = 0.03$, 这表明层错件与吸附原子件的相互作用能为 -0.01 eV 。

5. Si(111) 2×2 顶位吸附原子模型 在这个模型(见图2)中,包括1个吸附原子件和1个残留原子件(原子2)。计算得出这个模型的形成能 $E = 3.90 \text{ eV}$ 。由(3)式,并利用第三个模型所得出的 $E_a = 3.42 \text{ eV}$, 便得出残留原子件的有效形成能

$$E_{af}^* = 0.48 \text{ eV}.$$

因为 $E_{n1} = E_{ideal} = 1.42 \text{ eV}$, 所以得残留原子与吸附原子的总相互作用能 ($3V_{ar,1}$) 为 -0.94 eV 。可见,它们之间有强烈的相互作用,在结构稳定性的研究中,应必须计入。这种强烈相互作用的来源,可从它的能带结构得到了解。在单一的吸附原子结构和理想表面结构中,单填充表面态带的中心分别位于 0.63 eV 和 -0.07 eV , 而在本模型中,弛豫后这两个表面态带中心分别在 0.77 eV (属吸附原子件的)和 -0.65 eV (属残留原子件的)。这个结果与实验是相符合的。角分辨光电子谱^[14]和由扫描隧道显微镜新近发展的电流像隧道谱^[15],均观察到在 Fermi 能级以下 -0.6 至 -1.0 eV 处有一属于残留原子件的表面态。由于两个态的能量差别这样大,所以势必引起电子从吸附原子件的单填充表面态向残留原子件的单填充表面态转移,并使能量大为下降。不过,所挣得的能量有一部分为晶格应变能增加所抵消。

6. Si(111) $c(2 \times 4)$ 吸附原子模型 图3为此模型的顶视图。它和上一个模型类似,由1个顶位吸附原子件和1个残留原子件组成,但它们之间的几何配置不同,吸附原子有4个近邻的残留原子,其中2个较近(原子2),2个较远(原子2'),两者距离比为 $d_{12}/d_{12'} \approx 0.76$ 。这一结构的形成能比上一个模型高 0.02 eV , 即 $E = 3.92 \text{ eV}$ 。因此由(3)式可得,本几何配置下的有效形成能 $E_{af}^* = 0.50 \text{ eV}$ 。如果认为原子1和原子2的相互作用仍和上一模型一样,即 $V_{ar,1} = -0.94/3 = -0.31 \text{ eV}$, 则可得原子1和原子2'的

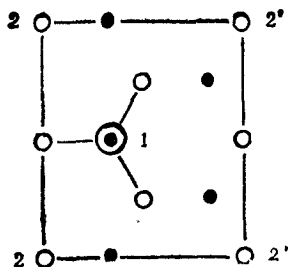


图3 Si(111) $c(2 \times 4)$ 吸附原子模型的单胞(未弛豫)
符号意义同图1

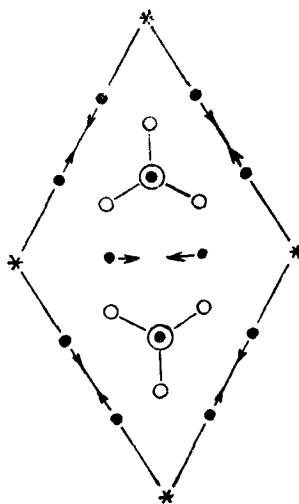


图4 Si(111) 3×3 DAS 模型的单胞(未弛豫)
*表示空位; 箭头表示发生二聚化的方向; 其余符号同图1

$V_{1,2} = -0.15 \text{ eV}$. 可见, 相互作用强度随距离增大而较快地下降.

7. Si(111) 3×3 DAS 模型 图4为本模型的顶视图, 它由2个顶位吸附原子件, 3对二聚体, 1个空位和3个第一层的层错原子组成. 在 DAS 模型中二聚体的情况与 Si(001) 2×1 中二聚体有显著差别: 在 DAS 中, 二聚体的原子是四配位的, 而在 Si(001) 2×1 中是三配位的, 因此二者的形成能可以有显著的差别. 此外, 在 DAS 模型中, 空位、吸附原子和二聚体三者互为最近邻, 应考虑三者之间相互作用. 可见, 以 Si(001) 2×1 中二聚体形成能作为 DAS 模型中二聚体有效形成能不是好的近似. DAS 模型中的空位的形成能亦是未知的, 但根据文献 [8] 和 [10], 他们得出 DS 模型(这是一个没有吸附原子, 只有层错、二聚体和空位的表面)中空位的有效形成能为 2.70 eV . 由于深层原子的状态受表面干扰较小, 可预料吸附原子与空位(处于表面下的第三层)的相互作用较小, 因此, 我们可以近似地取 2.70 eV 作为 DAS 模型中空位有效形成能, 以避免进一步的繁复的计算. 3×3 DAS 的形成能经计算得出为 $E = 9.26 \text{ eV}$, 再加上已知 $E_a = 3.42 \text{ eV}$ 和

$$E_{it}^* = 0.02 \text{ eV},$$

由(3)式便得二聚体的有效形成能 $E_{12}^* = -0.11 \text{ eV}$.

8. Si(111) 3×3 顶位吸附原子-空位模型 图5为本模型的顶视图. 它由2个顶位吸附原子和1个空位组成. 因为没有发生二聚化, 空位周围有6个位于第二层原子上的悬挂键, 这是与 DAS 模型中的空位不同之处. 经算得, 本模型的形成能为 13.04 eV , 于是得在周围有6个悬挂键的空位的有效形成能 $E_{it}^* = 6.20 \text{ eV}$.

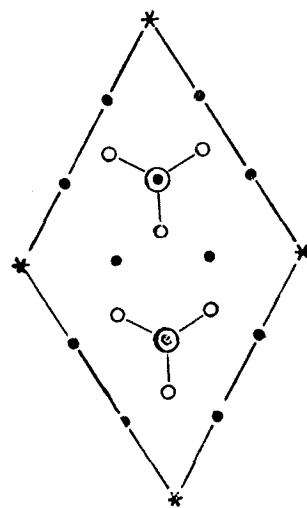


图5 Si(111) 3×3 吸附原子-空位模型的单胞(未弛豫) 符号意义同图4

表 1 各结构件的有效形成能或形成能(单位: eV)

	E_{ideal}	E_a^*	E_a	E_{r1}^*	E_{r2}^*	E_{r3}^*	E_{r4}^*	E_{r5}^*
第一组数据	1.42	0.02	3.42	0.48	0.50	-0.11	2.70	6.20
第二组数据	1.44	0.06	3.48	1.44	1.44	0.53	2.70	7.02†

注: 第一组数据是本职工作得出的数据。第二组数据引自文献[8], 有†号的 E_{r5}^* 是我们根据 E_{r1}^* 再加上三个悬键能量而得出的。

以上结果综述于表 1。为了比较, 我们同时给出文献[8]中相应数据作为第二组数据。第二组数据中, 没有考虑电子从一个原子到另一个原子的转移, 但考虑了弛豫效应引起的应变能的影响。

我们计算了 8 种表面结构以求得各种结构件的有效形成能, 其总的计算工作量与文献[9]为计算一个 7×7 结构的工作量相比是很小的。而我们通过相对来说是小量的计算, 却可得出很多大单胞表面模型的总能和结构稳定性的结论, 下一节将给出这些结果。

四、 7×7 DAS 结构模型的稳定性

由(4)式和表 1 中的数据, 不难计算各种涉及顶位吸附原子模型的相对表面能 ΔE 。

1. $(2n+1) \times (2n+1)$ DAS 模型 由于三角畴的性质, 在 $N \times N$ DAS 结构中, N 为偶数时, 在能量上是非常不利的, 故只考虑 $(2n+1) \times (2n+1)$ 结构, 其中 n 为正整数, $n=1$ 的情况见图 4。它含有 $n(n+1)$ 个吸附原子件, $n(n-1)$ 个残留原子件, $3n$ 个二聚体件, $n(2n+1)$ 个层错原子件和一个空位件, 因此

$$\Delta E = [n(n+1)E_a + n(n-1)E_{r1}^* + 3nE_{r2}^* + E_{r3}^* + n(2n+1)E_{r4}^*] / (2n+1)^2 - E_{ideal}$$

在本系列结构中最稳定的结构可由 $d(\Delta E)/dn = 0$ 确定。把表 1 中第一组数据代入, 得 $n = 3.25$, 即稳定结构在 7×7 与 9×9 之间。表 2 给出各种 n 值下相对表面能的结果。这两组数据均得出稳定结构为 7×7 , 但第一组数据的 ΔE 约为第二组的 2 倍。

表 2 $(2n+1) \times (2n+1)$ DAS 模型的相对表面能 ΔE (单位: eV)

	3×3	5×5	7×7	9×9	11×11	$\infty \times \infty$
第一组数据	-0.390	-0.471	-0.480	-0.478	-0.475	-0.435
第二组数据	-0.170	-0.230	-0.233	-0.228	-0.224	-0.180

2. $(2n+1) \times (2n+1)$ 吸附原子-空位模型 这是由 Binnig 等人^[2]提出来的模型。 $n=1$ 的情形见图 5。它含有 $n(n+1)$ 个吸附原子件, $n^2 + n - 2$ 个残留原子件和一个空位件。这个空位周围的第二层原子共有 6 个悬挂键。在这个模型中残留原子有两种几何配置, 一种周围有 3 个近邻的吸附原子, 另一种有 4 个近邻的吸附原子, 前者有 $(n-1)^2$ 个, 后者有 $3(n-1)$ 个, 因此

$$\Delta E = [n(n+1)E_a + (n-1)^2E_{r1}^* + 3(n-1)E_{r2}^* + E_{r3}^*] / (2n+1)^2 - E_{ideal}$$

把表 1 的数据代入后, 其结果列于表 3。可见这两种数据均得出 7×7 结构为非稳定结

表3 (2n+1)×(2n+1) 吸附原子-空位模型的相对表面能 ΔE (单位: eV)

	3×3	5×5	7×7	9×9	11×11	∞×∞
第一组数据	+0.029	-0.272	-0.356	-0.390	-0.408	-0.445
第二组数据	+0.113	-0.094	-0.151	-0.174	-0.186	-0.210

构,稳定的结构为∞×∞。

3. (2n+1)×(2n+1) 吸附原子模型 这个模型为 Harrison^[16] 提出。把吸附原子-空位模型中的空位换为一个吸附原子,便成本模型。因此,它比吸附原子-空位模型多一个吸附原子而没有空位,故此

$$\Delta E = [(n^2 + n + 1)E_s + (n - 1)^2 E_{\uparrow}^* + 3(n - 1)E_{\downarrow}^*] / (2n + 1)^2 - E_{ideal}$$

表4为所得的相对表面能。可见两者均得出7×7结构是不稳定的。但是,第一组数据的稳定结构为∞×∞,第二组数据的稳定结构为3×3。可见充分考虑结构件的相互作用是必要的。

表4 (2n+1)×(2n+1) 吸附原子模型的相对表面能 ΔE (单位: eV)

	3×3	5×5	7×7	9×9	11×11	∞×∞
第一组数据	-0.280	-0.383	-0.412	-0.424	-0.431	-0.455
第二组数据	-0.280	-0.235	-0.223	-0.218	-0.215	-0.210

4. 其它顶位吸附原子模型 在表5中给出一些其它周期性的顶位吸附原子模型。在这些模型中不包含层错、二聚体和空位。

表5 几种不同周期性的吸附原子模型的相对表面能 ΔE (单位: eV)

	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	2×2	c(2×4)	c(2×8)	6×6
第一组数据	-0.280	-0.445	-0.440	-0.435	-0.432
第二组数据	-0.280	-0.210	-0.210	-0.210	-0.210

由上面得到的主要结果概述如下:

(1) Harrison 和 Binnig 等人提出的7×7模型是不稳定的。

(2) Takayangi 等人提出的7×7 DAS 模型是稳定的。

(3) 利用本工作得出的有效形成能(即第一组数据),在所有已计算的模型中,7×7 DAS 的表面能是最低的,为-0.480 eV,也比 Si(111) 2×1 的π-键链模型的表面能-0.36 eV^[17]为低,这是与实验结果相符的。

(4) 对于第二组数据,在本文已计算过的所有模型当中, $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 吸附原子模型的表面能最低。这与第一组数据的结果相矛盾,也与实验结果相矛盾。这说明在使用结构件概念时,必须计及结构件之间的强烈相互作用。

与 Qian 和 Chadi^[9] 的计算结果相比较是很有意义的。他们也是用紧束缚法进行计算,但他们直接对每个单胞内含有249个原子的薄层模型进行计算,所得到的7×7 DAS 模型和5×5 DAS 模型的相对表面能分别为-0.403 eV 和-0.395 eV,与我们所

得的结果相当接近,只分别高出 0.076 eV 和 0.077 eV. 引起这种小差别原因是多方面的. 首先,我们的计算作了最近邻作用近似,其次,我们采用的空位有效形成能 E_v^* 的值不是从紧束缚法计算出来的,再者,在文献 [9] 中,采用布里渊区的中心点作为特殊点进行计算,并且所采用的薄片模型比我们的少两层,这两点都必然导致所得的表面能系统地偏高,考虑了这个因素,两个方法所得的结果的偏差应更小.

五、结 论

我们计算了各种结构件的有效形成能,由此得到在所有已计算过的结构中, 7×7 DAS 模型最为稳定,并且指出, 7×7 吸附原子模型和 7×7 吸附原子-空位模型不稳定. 第一个关于 Si(111) 7×7 结构模型: Lander 和 Morrison 的空位模型^[18],利用表 1 中的数据,容易判断它是不稳定的结构,因为在 Si 中,每产生一个空位,都要花费很大的能量.

我们得到 5×5 和 7×7 DAS 模型的表面能分别为 -0.471 eV 和 -0.480 eV,与 Qian 和 Chadi 的结果接近,说明本文的计算方法是合理的. 可以预料,如果用自洽的方法计算结构件的形成能和它们之间的相互作用能,将会得到更好的结果,将会在定量上给出各种大单胞表面能的可靠知识,而目前的计算机能力,还不允许人们对大单胞表面作自洽的计算.

工作中得到本校计算中心的大力支持,特此致谢.

- [1] R. E. Schlier and H. E. Fransworth, *J. Chem. Phys.*, **30**(1959), 917.
- [2] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 120.
- [3] E. G. McRae and C. W. Caldwell, *Phys. Rev. Lett.*, **46**(1981), 1632; E. G. McRae, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 2305.
- [4] P. A. Bennett, L. C. Feldman, Y. Kuk, E. G. McRae and J. E. Rowe, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 3656.
- [5] K. Takayangi, Y. Tanishiro, M. Takahashi and S. Takahashi, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A3**(1985), 1502.
- [6] K. Takayangi, Y. Tanishiro, S. Takahashi and M. Takahashi, *Surf. Sci.*, **164**(1985), 367.
- [7] J. E. Northrup, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 154.
- [8] Guo-Xin Qian and D. J. Chadi, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B4**(1986), 1079.
- [9] Guo-Xin Qian and D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 1288.
- [10] D. Vanderbilt, in the Structure of Surfaces II, Editors: J. F. Van der Veen, M. A. Van Hove, Springer-Verlag, (1988).
- [11] D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 785.
- [12] Huizhou Liu, Geng Xu and Zheyin Li, in the Structure of Surface II, Editors: J. F. Van der Veen, M. A. Van Hove, Springer-Verlag, (1988).
- [13] J. E. Northrup, in Proceeding of the 18th International Conference on the Physics of Semiconductors, Edited by O. Engström, World Scientific, Singapore, (1987).
- [14] I. G. Uhrberg, G. V. Hansson, J. M. Nicholls, P. E. S. Persson and S. A. Flodstrom, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 3805.
- [15] R. J. Hamers, R. M. Tromp, J. E. Demuth, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 1972.
- [16] A. Harrison, *Surf. Sci.*, **55**(1976), 1.
- [17] J. E. Northrup, M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.*, **49**(1982), 1349.
- [18] J. J. Lander, J. Morrison, *J. Appl. Phys.*, **34**(1963), 1403.

THE STABILITY OF STRUCTURE MODELS OF Si(111) 7×7 SURFACE

LIU HUI-ZHOU LI ZHE-YIN

Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou

(Received 12 September 1988)

ABSTRACT

In this paper, based on the concept of building blocks with interactions, we study the stability of models of Si(111) 7×7 reconstructed surface. With use of tight-binding method, we calculated formation energies of various building blocks and their interactions. With these building blocks, various large unit surfaces can be constructed and their total energies can be easily estimated, without heavy calculations. We evaluate the surface energies of Si(111) 5×5 and 7×7 DAS models, and get the results of -0.467 eV and -0.477 eV, respectively, close to the results of Qian and Chadi^[1]. Moreover, we point out that neither the 7×7 adatom model^[16] nor the 7×7 adatom-vacancy model^[2] are stable.