

Si(111) 理想、弛豫及 2×1 重构表面的声子谱研究

林子敬 汪克林

(中国科学技术大学基础物理中心)

1988年8月22日收到

本文利用微扰的方法考虑了占据态与空态间的耦合对能带能量的影响,给出延展键轨道近似下半导体力常数的解析表达式.利用这些表达式求出 Si(111) 的理想、 1×1 弛豫及 2×1 Haneman 模型重构表面的声子色散曲线及其表面振动的振幅分布.不同表面结果的比较显示弛豫及重构对表面声子性质具有决定性的影响.同时,分析表明 Haneman 的 2×1 表面重构模型不足以满意地解释有关实验结果.

一、引言

表面的许多物理过程都与表面振动有关.关于表面声子谱的细致研究,对清洁及吸附表面的扩散、相变、吸附、脱附及原子与分子和表面的相互作用等动力学过程的研究是非常需要的;对表面的能量转移及耗散的定量研究也是必不可少的.而且,与吸附物相联系的振动模式的频率可提供表面与吸附物间的键合、吸附粒子的几何位置以及表面上相邻原子或分子间耦合等方面的信息.

近些年来,随着实验技术的发展有了一些可信的表面声子色散曲线;并可预期不久就会出现更多的实验测量.因此很需要理论对这些实验结果作出适当解释并提供对表面上原子结构及原子间相互作用力的性质的了解.

晶体表面的声子色散曲线可以通过解诸如平板或半无限固体的振动模式而得.早期的计算用 Lennard-Jones 势描述原子间的作用^[1].近期的研究大都使用由拟合测量所得的体声子色散曲线而导出的较真实的力常数,并结合一些表面力常数的经验调节来得出表面模式的实验频率^[2-4].但是,由此定出的表面力常数的变化对拟合体声子所采用的模型相当敏感^[5-7].最近,从头计算^[8,9]及半经验^[10-15]的方法在确定力常数的变化方面有一定进展. Mele 小组^[10-12]将 Chadi 的参数化的紧束缚总能计算方法应用于半导体表面声子研究,获得相当的成功.文献[15]则进一步采用成键轨道近似简化电子能带结构能量的计算,得出力常数随电子结构及几何结构变化的解析表达式.由于它的简便,这种方法特别适宜于对复杂体系振动如表面声子的研究.但因为成键轨道近似忽略了占据态与非占据态之间的耦合对能带能量的影响,而这种影响并非总可忽略的^[16].因此,它在表示力常数随表面原子弛豫而变化时显得过于粗糙.为此,本文在紧束缚成键轨道理论方法的基础上将这种占据态与非占据态之间的耦合对能量的影响作为微扰,重新给出力常数随

原子结构及电子结构变化的较为精确的表达式。并分别对 Si(111) 的理想、 1×1 弛豫及 Haneman 模型的 2×1 重构表面声子色散曲线及振幅分布进行了计算, 讨论弛豫及重构对表面振动带来的影响。通过对已有理论及实验的比较, 表明 1×1 弛豫及 2×1 重构表面的原子结构及其晶格动力学需要进一步的研究。

二、理论简介

Harrison 发展了一种简单但近似程度较好的能解释共价半导体体系的几乎所有电子结构性质的紧束缚理论^[16-18]。该理论对体系的力学性质也给出了恰当的描述^[16,19,20], 因此, 可以把它作为计算力常数的出发点。

1. 体系总能

根据紧束缚理论, 体系的总能可由如下哈密顿量得到:

$$H = 2 \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta=s,p} h_{i\alpha,j\beta} a_{i\alpha}^{\dagger} a_{j\beta} + U_{\text{elastic}} = H_b + U_{\text{elastic}}. \quad (1)$$

这里 i 和 j 是离子的标号, α 和 β 表示紧束缚电子轨道 (s 及 p 轨道), 当 i 和 j 是最近邻离子时, 耦合参数 $h_{i\alpha,j\beta} = \langle i\alpha | H | j\beta \rangle$ 随 ij 间距离即键长 d 的平方倒数而变化; $h_{i\alpha,i\alpha} = \epsilon_{\alpha}$ 是紧束缚轨道能量, 其余 $h_{i\alpha,j\beta}$ 为零。因子“2”来源于自旋求和, U_{elastic} 是经验弹性势, 来源于离子间的排斥势及由 H_b 而重复计算的电子-电子相互作用, 并可用参数化的最近邻作用形式表示

$$U_{\text{elastic}} = \sum_{\langle ij \rangle} (U_1 \epsilon_{ij} + U_2 \epsilon_{ij}^2). \quad (2)$$

这里 $\epsilon_{ij} = d_{ij}/d_0 - 1$ 是 ij 间键长偏离体平衡值 d_0 的相对变化; U_1 及 U_2 是两个参数, 由体声子性质决定。

将 s , p 轨道组合成成键轨道及反键轨道^[16], 则(1)式中的 H_b 变为

$$H_b = 2 \sum_{\alpha,\beta=a,b} V_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} = H_0 + H', \quad (3)$$

$$H_0 = 2 \sum_{ij} [V_{a_i a_j} a_{a_i}^{\dagger} a_{a_j} + V_{b_i b_j} a_{b_i}^{\dagger} a_{b_j}], \quad (4)$$

$$H' = 2 \sum_{ij} [V_{a_i b_j} a_{a_i}^{\dagger} a_{b_j} + V_{b_i a_j} a_{b_i}^{\dagger} a_{a_j}]. \quad (5)$$

上述三式中, 下标 a 和 b 分别指反键轨道和成键轨道。零级哈密顿量 H_0 表示成键轨道和反键轨道无耦合的情况, 其能带能量即为所有占据轨道的能量和。即 $E_w^{(0)} = 2 \sum_i V_{b_i b_i}$

或写成 $E_w^{(0)} = 2 \sum_b \epsilon_b$ 。

根据二阶微扰论, 当考虑反键轨道与成键轨道之间的耦合 H' 后, 体系的能带结构能量为

$$E_{b_i} = 2 \sum_b \left[\varepsilon_b + \sum_a \frac{V_{ab}V_{ba}}{\varepsilon_b - \varepsilon_a} \right], \quad (6)$$

式中 $\sum_b \left(\sum_a \right)$ 表示对所有成键(反键)态求和, ε_b (ε_a) 是其对应的轨道能量; $V_{ab} = \langle a | H | b \rangle$ 是成键与反键轨道间的哈密顿矩阵元。

2. 力常数的计算

由(6)式,能带结构对力常数的贡献为

$$\Phi_{iaj\beta}^{EB} = 2 \left[\sum_b \frac{\partial^2 \varepsilon_b}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} + \sum_b \sum_a \frac{\partial^2}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} \frac{V_{ab}V_{ba}}{\varepsilon_b - \varepsilon_a} \right]. \quad (7)$$

假定 V_{ab} 随原子位移的变化与 ε_a 或 ε_b 随原子位移的变化相比可以忽略,则

$$\begin{aligned} \Phi_{iaj\beta}^{EB} = 2 \left\{ \sum_b \frac{\partial^2 \varepsilon_b}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} + \sum_b \sum_a \frac{\partial^2 (\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} \frac{V_{ab}V_{ba}}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^2} \right. \\ \left. + 2 \sum_b \sum_a \frac{V_{ab}V_{ba}}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^3} \frac{\partial (\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\partial x_{ia}} \frac{\partial (\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\partial x_{j\beta}} \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

由文献[15]可以知道,如果 ij 非最近邻成键原子对,则上式第一项及第二项均为零;而当 ij 为成键原子对时,可以合并前两项而成

$$\begin{aligned} \Phi_{iaj\beta}^{EB} = 2 \sum_b \frac{\partial^2 \varepsilon_b}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} \left[1 - \sum_a \frac{2V_{ab}V_{ba}}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^2} \right] \\ + 4 \sum_a \sum_b \frac{V_{ab}V_{ba}}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^3} \frac{\partial (\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\partial x_{ia}} \frac{\partial (\varepsilon_a - \varepsilon_b)}{\partial x_{j\beta}}. \end{aligned} \quad (9)$$

这里忽略了 $[\varepsilon_b(ij) - \varepsilon_a]^{-2} V_{ab}V_{ba}$ 与 $[\varepsilon_b - \varepsilon_a(ij)]^{-2} V_{ab}V_{ba}$ 的差别 ($\varepsilon_b(ij)$ 指 ij 键成键能, $\varepsilon_a(ij)$ 指 ij 键的反键能量)。(9)式等号右端第一项只对最近邻作用有贡献,且此时只有一项,即 $2 \frac{\partial^2 \varepsilon_b(ij)}{\partial x_{ia} \partial x_{j\beta}} \left[1 - \sum_a \frac{2V_{ab}V_{ba}}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^2} \right]$ 。

与文献[15]相似,将(7)式中的 ε_a , ε_b 表示成 x_{ia} , $x_{j\beta}$ 的函数,通过直接微分便可求得结果。

1) 最近邻作用

$$\begin{aligned} \Phi_{iaj\beta}(1) = -\delta_{\alpha\beta} \left\{ \frac{U_1 + 2U_2\varepsilon_{ij}}{d_0d} + \frac{4V_2\alpha_c + 2V_2\alpha_c}{d^2} \left[1 - 2 \sum_a \frac{V_{ab}^2}{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2} \right] \right\} \\ + \left\{ \frac{U_1 - 2U_2}{d_0d} + \frac{16V_2\alpha_c + 8V_2\alpha_c\alpha_p^2 + 2\alpha_cV_2}{d^2} \left[1 - 2 \sum_a \frac{V_{ab}^2}{(\varepsilon_b - \varepsilon_a)^2} \right] \right. \\ \left. + \frac{4\alpha_c^2[4V_1'' - 9V_1'' - 10V_1'']}{V_2d^2} \right\} \frac{(x_{ia} - x_{ja})(x_{i\beta} - x_{j\beta})}{d^2}, \end{aligned} \quad (10)$$

式中 d 是 i 与 j 的平衡键长,而

$$V_1'' = \alpha_p^2 V_1'^2 - \alpha_p \alpha_c \frac{V_1^a - V_1^i}{2} + \frac{\alpha_c^2}{8} (V_1'^2 + V_1^i), \quad (11)$$

$$V_1' = (1 + \alpha_p^2) V_1^i / 4, \quad (12)$$

$$V_1^i = (1 + \alpha_p^2) V_1^i / 4. \quad (13)$$

(10)–(13)式中诸量的定义及计算请参阅文献[15]及[16]。

2) 次近邻作用

将两阴离子间及两阳离子间的相互作用分别记为 $\Phi_{iaj\beta}^a(2)$ 和 $\Phi_{iaj\beta}^c(2)$, 有

$$\begin{aligned} \Phi_{iaj\beta}^{a,c}(2) = & \frac{-4\alpha_c^5}{V_2 d_{ik}^2 d_{jk}^2} \left\{ \left[\left(\alpha_p V_1^2 \mp \frac{\alpha_c}{2} V_1^{a,c} \right)^2 - 2V_5^{a,c} \right] (x_{ia} - x_{ka})(x_{j\beta} - x_{k\beta}) \right. \\ & + (V_4^{a,c} - V_5^{a,c}) [(x_{ia} - x_{ka})(x_{j\beta} - x_{k\beta}) \\ & \left. + (x_{j\alpha} - x_{k\alpha})(x_{j\beta} - x_{k\beta})] \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

这里 x_{ka} 是离子 i 与 j 的公共最近邻 k 的坐标. (14) 式等号右端第一项中的“-”和“+”分别对应于阴离子间和阳离子间的相互作用.

3) 三近邻作用

如图 1 所示, 有两种形式的三近邻. 对图 1(a) 情形, 得到

$$\Phi_{iaj\beta}^a(3) = -\frac{4\alpha_c^5 V_5^{a,c}}{V_2} \left[\frac{(x_{ia} - x_{i'a})(x_{j\beta} - x_{j'\beta})}{d_{ii'}^2 d_{jj'}^2} + \frac{(x_{ia} - x_{i''a})(x_{j\beta} - x_{j''\beta})}{d_{ii''}^2 d_{jj''}^2} \right]. \quad (15)$$

这里 d_{AB} 指离子 A 和 B 间的平衡距离.

对图 1(b), 有

$$\Phi_{iaj\beta}^b(3) = -\frac{4\alpha_c^5 V_4^{a,c}}{V_2} \frac{(x_{ia} - x_{i'a})(x_{j\beta} - x_{j'\beta})}{d_{ii'}^2 d_{jj'}^2}. \quad (16)$$

(10), (14)–(16) 式给出了力常数计算的解析式. 这些公式明确地表示出表面力常数变化与表面原子几何位置变化的关系. 一旦表面结构给定, 便能求出力常数的变化, 并进而给出表面声子色散曲线.

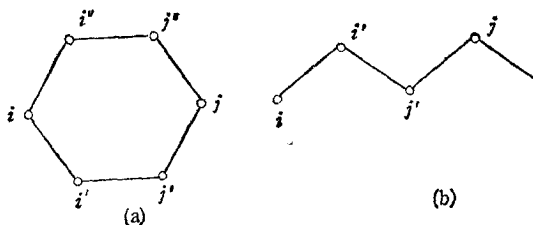


图 1 闪锌矿结构的两种三近邻形式示意图

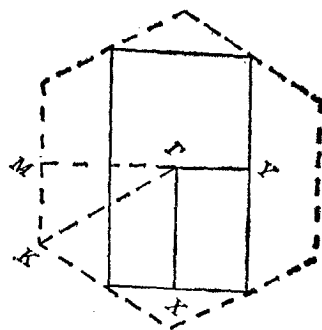


图 2 Si(111) 表面的二维布里渊区 虚线对应于未重构表面; 实线对应于 2×1 重构表面

三、理想及弛豫的 Si(111) 表面声子

Si(111) 表面在较高温度下常呈现 1×1 结构. 这种结构可通过在表面上吸附其他原子或淬灭而在室温下稳定下来. 另外, 经激光的处理, 表面也会在室温下出现 1×1 的结构^[21]. 根据 Pandey 和 Phillips 的计算, 1×1 弛豫表面较之理想, 其表面原子朝体内方向弛豫了 $0.33 \text{ \AA}$ ^[22]. 这种弛豫对表面力常数的影响可由 (8), (12)–(14) 式计算. 图 2 中虚线给出理想或弛豫 Si(111) 表面的二维布里渊区, 并算出计算表面声子时用到

的一些对称点的记号。

常存在一些表面模,如长波 Rayleigh 模,其振动向体内的穿透深度很大. 为了避免这种表面模在具有两个相同自由面的平板模型计算中由于两个面上的振动模强烈耦合而影响色散行为^[11],我们采用一面原子自由而另一面固定的平板模型,如图 3.

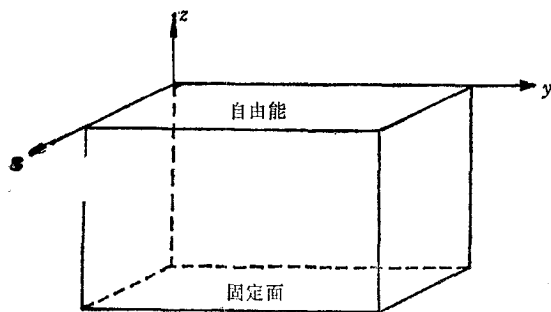


图 3 本文计算所采用的平板模型 平板的上表面原子是自由的,而下表面则固定

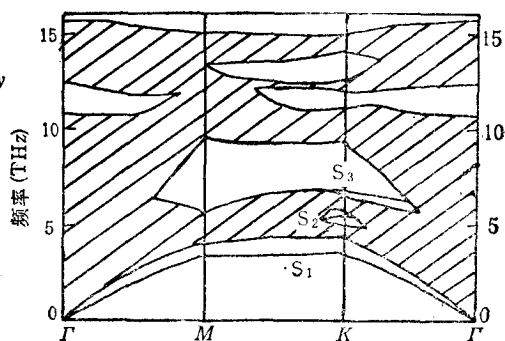


图 4 理想 Si(111) 表面的表面声子色散曲线 阴影部分为体投影带

采用图 3 结构的 31 层平板模型作近似计算,得到的 Si(111) 理想及 1×1 弛豫表面的表面声子色散曲线分别示于图 4 和图 5. 图 6, 图 7 和图 8 则分别给出这两表面上的某些特殊波矢的表面声子振动振幅向体内衰减的情况. 由于对 Si(111) 表面,最外层原子与次表面层原子间的距离与第二层及第三层间的层间距相比很小,故图 6—图 8 中横坐标 m 采用双层为计数单位,如 $m=1$ 表示最表面的双层. 纵坐标是在同一双层内每单胞原子振幅之和.

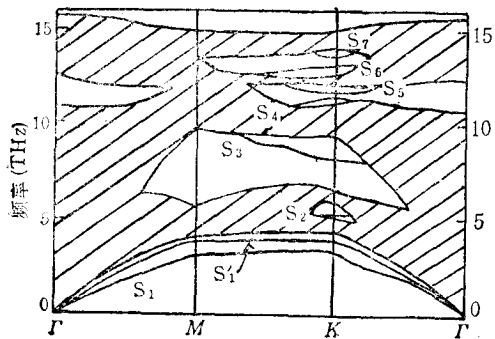


图 5 1×1 弛豫的 Si(111) 表面声子色散曲线

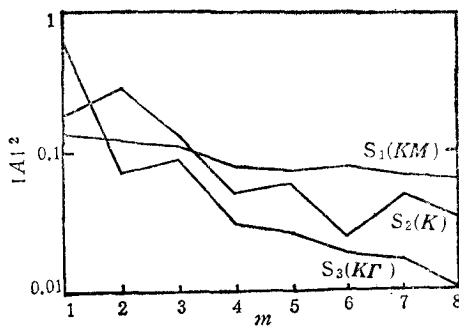


图 6 理想 Si(111) 表面声子振动的振幅分布 $S_n(q)$ 表示表面模 S_n 分支在波矢 q 点的振动; $S_n(q_1, q_2)$ 表示 S_n 在波矢为 q_1, q_2 间中点的振动

比较图 4 和图 5 不难看出,表面力常数的改变对表面声子谱具有重要的影响. 弛豫表面没有理想表面的 S_3 ,但比理想表面多出 S'_1, S'_2 及 S_4-S_7 . 两表面相对应的表面模其能量位置也有变化. 这两个表面原子排列的周期是相同的,差别仅在于表面层与次表面

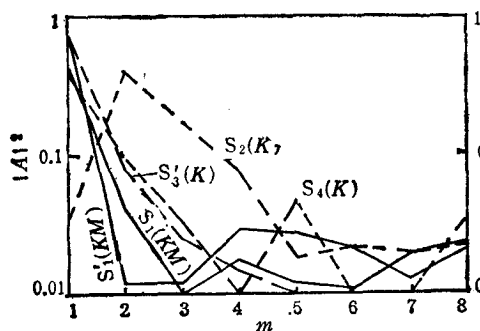


图 7 部分 Si(111)-1×1 弛豫表面的表面声子振动分布

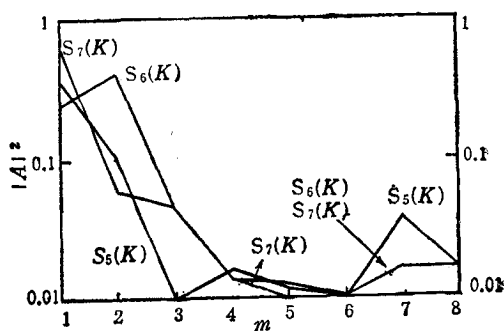


图 8 部分 Si(111)-1×1 弛豫表面的表面声子振动分布

层的层间距不同。由此可见,表面振动谱对局域的原子结构远比对长程序敏感。理想表面与弛豫表面的差别还反映在它们的振动方式上。图 6 和图 7 显示它们振动衰减的显著不同。对这两个表面相对应的表面模中,弛豫表面的表面模向体内衰减一般比理想表面的表面模衰减得快。这种振动分布的差别对实验观察有很大影响。由于表面声子与电子或 He 原子^[23]非弹性散射的反应截面主要取决于表面原子的振动振幅。所以,对波长比较长的瑞利模(S_1),尽管用理想表面和用弛豫表面计算所得的声子能量很相近,但与探测粒子的非弹性反应截面却大不相同。以图 6 和图 7 可以看出,实际实验观察 S_1 应比用理想表面近似所预言的容易。当然,这只对瑞利模 S_1 成立。对表面模 S_2 ,尽管弛豫表面的振动向体内衰减比较快,但振动主要集中于第二双层。就第一双层而言,理想表面的振幅要大得多。所以,实验观察强度应比用理想表面所计算出来的要小。实验确实在 220 cm^{-1} 附近观察到一个微弱的吸收峰^[22],但峰很宽,因此并不能完全用 S_2 解释。看来结合 Daum 等人的吸附 Si 原子模型^[22]及 Becker 等人提出的 dimer-adatom-stacking fault model^[24] 进行晶格动力学计算是必要的。

四、Si(111)-2×1 Haneman 模型的振动谱

尽管人们对 Si(111) 表面做了大量研究, 7×7 及 2×1 重构表面的详细原子结构及电子结构至今尚未得到充分的了解。对 2×1 重构表面,近年的实验研究如 LEED^[25] 和 STM^[26] 支持 Pandey 提出的 π 键链模型^[27],并指出链有一定的倾斜。但 Chadi 经过仔细研究,认为一些紫外光发射谱数据并不能由 Pandey 模型满意地解释,而必须同时考虑 Pandey 模型的 π 键对聚的结构形式^[28]。正如 Harten 等人指出,由于有关实验结果的重复性及对解理状况的依赖性,该表面的结构尚难有定论。最近他们对该表面振动模的测量结果与 Alerhand 等人根据 Pandey 模型所做的晶格动力学计算结果^[12]有相当的偏离。由于表面振动提供了表面几何结构与表面电子结构相互关联的直接实验验证途径,实验声子谱测量结果与理论的差别使得 Harten 等人推断应该存在其他类型的重构几何^[29]。

究竟何种形式的重构表面能够解释 Harten 等人的声子测量实验中偏离 Pandey 模型计算结果的声子模目前并不清楚。考虑到表面声子对表面局域结构的敏感性,对 Haneman 模型进行计算可以指明这种新的重构几何是否具有类 Haneman 模型的局域结构。

Si(111)- 2×1 表面的布里渊区如图 2 实线所示。Haneman 重构模型中表面原子的几何位置采用 Chadi 用紧束缚法计算所得的结果^[20]。图 9 是根据这种几何结构用 (10), (14)–(16) 式计算得到的表面声子色散曲线。计算采用的平板厚度为 21 层。图 10 及图 11 分别给出表面模在某些特殊波矢点的振动分布。

从图 9 可以看到, Haneman 模型的 Si(111)- 2×1 表面共有 9 个表面振动模式。存在于整个布里渊区且具有比体光学声子更高能量的反常表面声子模 S_8 和 S_9 来源于表面平面内力常数的增强。 S_1 是瑞利模, Γ -Y 的表面模 S_2 其实对应于理想表面中 MY 的 S_1 瑞利模,只是由于此时为 2×1 重构,布里渊区缩小了一倍,理想表面的 Γ -M 对应于 2×1 表面的 Γ -Y- Γ , 导致了图 9 的对折效应。图 9 中几乎没有色散的能量为 58 MeV 的表面模 S_7 完全浸没在体投影带中且存在于整个布里渊区。它对应于 1971 年 Ibach 发现的能量为 56 MeV 的表面模。在 Γ 点,这个模的振动完全集中

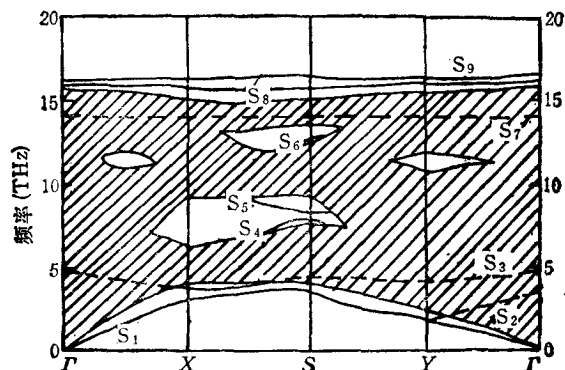


图 9 Haneman 模型的 Si(111)- 2×1 重构表面声子色散曲线

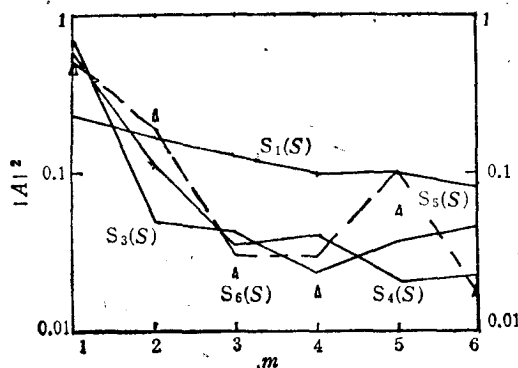


图 10 Haneman 模型的 Si(111)- 2×1 表面部分声子在 S 点的振动分布

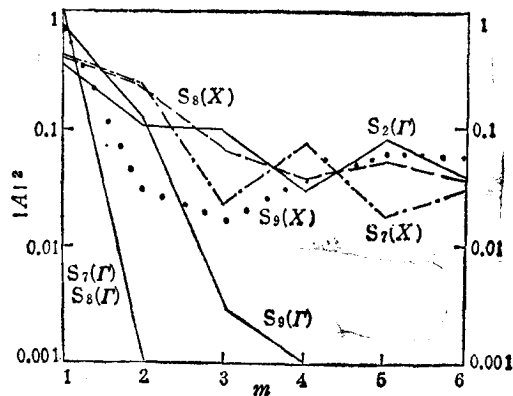


图 11 Haneman 模型的 Si(111)- 2×1 表面部分表面声子的振动分布

于最表面双层内。最近 Pennino 等人对此表面模进行了实验测量,结果表明在 Γ -X 之间 S_7 确实是几乎无色散的^[30]。

表面模 S_9 对我们的研究目的具有特殊的重要性。在 Pandey 模型中, Alerhand 等

人计算所得的 S_3 在 X 点的能量为 14 MeV, 而在本文即 Haneman 模型中则为 15.6 MeV 这一数值与实验观察所得 11.5 MeV 有较大差别. 差别更大的是在布里渊区中心 Γ 点, 实验值为 10.5 MeV, 而本文为 19.8 MeV. 实验上 Γ 与 X 间该声子模的色散很小, 而在图 9 则不然. 理论计算与实验测量之间的这种巨大差别表明, Haneman 模型并不能满意地解释 Si(111)- 2×1 表面声子谱的实验结果. 所以, 对 Si(111)- 2×1 表面声子谱还需要作进一步的研究, 这包括对不同表面结构模型和对同一表面结构模型但表面相互作用机制不同的晶格动力学计算.

五、结论和讨论

本文所得的结果概括如下:

1) 根据 Chadi 的紧束缚近似哈密顿量及 Harrison 的键轨道概念和矩阵元与键长平方成反比的关系, 并把占据态与非占据态间的耦合作为微扰, 得到了直至三近邻作用的力常数解析表达式.

2) 计算了 Si(111) 的理想及弛豫表面的声子色散曲线及表面模振动向体内衰减的情形. 结果表明, 表面力常数的变化引起表面模的很大变化. 即模的数目、声子能量及局域程度都有较大的不同.

3) 用 Haneman 模型计算 Si(111)- 2×1 表面得到的表面模 S_3 的能量、色散等性质与实验相近; 但对表面模 S_3 , 理论与实验差别较大. 因此与 Pandey 模型一样都不能完全满意地解释实验.

4) 本文得到的简便的计算力常数的公式适用于由 s , p 轨道杂化组成的共价键的体系, 包括体内缺陷及表面重构的情形. 很适合求解复杂重构表面的晶格动力学问题. 但也应指出这个方法还有值得改进之处. 例如, 由于电子结构的变化, 表面与体是否能用同一个哈密顿量描写? 可能对于表面会有附加项, 这附加项对力常数的贡献便要另作讨论. 又如对于 d 电子起相当大作用的体系本文的方法应作怎样的修正等都是应该在今后继续研究的.

- [1] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. de Wette, *Phys. Rev.*, **B4**(1971), 1648 and 1661.
- [2] G. Benedek *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 526.
- [3] W. Goldammer *et al.*, *Surf. Sci.*, **141**(1984), 139.
- [4] V. Bertolani *et al.*, *Surf. Sci.*, **189/190**(1987), 675.
- [5] A. D. Kulkarni and F. W. de Wette, *Surf. Sci.*, **186**(1987), 469.
- [6] A. G. Eguiluz, R. F. Wallis and A. A. Maradudin, in *Proceedings of the Second International Conference on Phonon Physics*, edited by J. Koller *et al.*, World Scientific, Singapore, (1985).
- [7] Mohamed H. Mohamed *et al.*, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 2763.
- [8] A. G. Eguiluz, A. A. Maradudin & R. Wallis, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 309.
- [9] K. M. Ho, K. P. Bohnen, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 934.
- [10] D. L. Alerhand and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 826.
- [11] E. J. Mele *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B3**(1985), 1068.
- [12] D. L. Alerhand, D. C. Allan, E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 2700.
- [13] S. Tiersten, S. C. Ying, T. L. Reinecke, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4062.
- [14] C. S. Jayanthi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 795.

- [15] 林子敬、汪克林, 物理学报, **37**(1988), 1932.
- [16] W. A. Harrison, *Electron Structure and Properties of Solids*, Freeman, San Francisco, (1980).
- [17] W. A. Harrison, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 5835.
- [18] W. A. Harrison, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3592.
- [19] Mark van Schilfgaarde and Arden Sher, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 4375.
- [20] D. J. Chaid, *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 2074.
- [21] D. Haneman, *Advances in Physics*, **31**(1982), 165.
- [22] W. Daum, H. Ibach and J. E. Miller, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 1593.
- [23] see review article by J. P. Toennies, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A2**(1984), 1055.
- [24] R. S. Becker *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 1020.
- [25] M. A. Olmstead, *Surf. Sci. Rep.*, **6**(1987), 159.
- [26] R. M. Flenstra, W. A. Thompson and A. P. Fein, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 608.
- [27] K. C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 1913.
- [28] D. J. Chaid, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 4762.
- [29] U. Harten, J. P. Toennies and Ch. Woll, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2947.
- [30] U. del Pennino *et al.*, *Surf. Sci.*, **189/190**(1987), 689.

INVESTIGATION OF SURFACE PHONONS AT IDEAL, RELAXED AND 2×1 RECONSTRUCTED Si(111) SURFACE

LIN ZI-JING WANG KE-LIN

(Centre for Fundamental Physics, University of Science and Technology of China, Hefei)

ABSTRACT

Using the perturbation method to study the influence of the coupling between occupied states and empty states on the electronic band energy, we obtained analytical expressions for semiconductor force constant calculation within the scheme of extended band orbital approximation. The surface phonon dispersion curves and related vibrational amplitude distribution of Si(111) ideal, 1×1 relaxed and 2×1 reconstructed Haneman model surfaces are calculated by means of these expressions. The results for different surfaces show the important effects of surface relaxation and reconstruction on the properties of surface phonons. It is also shown that the Haneman model for Si(111)— 2×1 reconstructed surface can not explain the experimental surface phonon measurement very well.