

用低能电子衍射研究 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}$ 0)表面的弛豫

蓝 田 徐飞岳

电子科技大学化学系, 成都, 610054

1989年5月4日收到

用低能电子衍射研究了 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}$ 0)表面的弛豫, 发现当理论计算与实验符合得很好时其结构是: 保持表面上 A—B 键长不变, 用一个旋转角 ω , 使 B 原(离)子向外移动, A 原(离)子向内移动, 第一表面原子层间距 $d_1 = 0.610-0.810 \text{ \AA}$ [对 IIIA-VA(110)], $0.536-0.825 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(110)] 和 $0.633-1.060 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(10 $\bar{1}$ 0)], 第二表面原子层间距 $d_2 = 1.300-1.610 \text{ \AA}$ [对 IIIA-VA(110)], $1.430-1.700 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(110)] 和 $0.820-0.930 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(10 $\bar{1}$ 0)], 而第三表面原子层间距 $d_3 = 1.410-2.440 \text{ \AA}$ [对 IIIA-VA(110)], $2.020-2.250 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(110)] 和 $1.910-2.440 \text{ \AA}$ [对 IIB-VIA(10 $\bar{1}$ 0)]. 对此结构, 弛豫率 α 是: 0.24 ± 0.02 [对 IIIA-VA(110)], 0.25 ± 0.02 [对 IIB-VIA(110)] 和 0.33 ± 0.03 [对 IIB-VIA(10 $\bar{1}$ 0)].

PACC: 6144H; 6820 ; 6830; 7510L

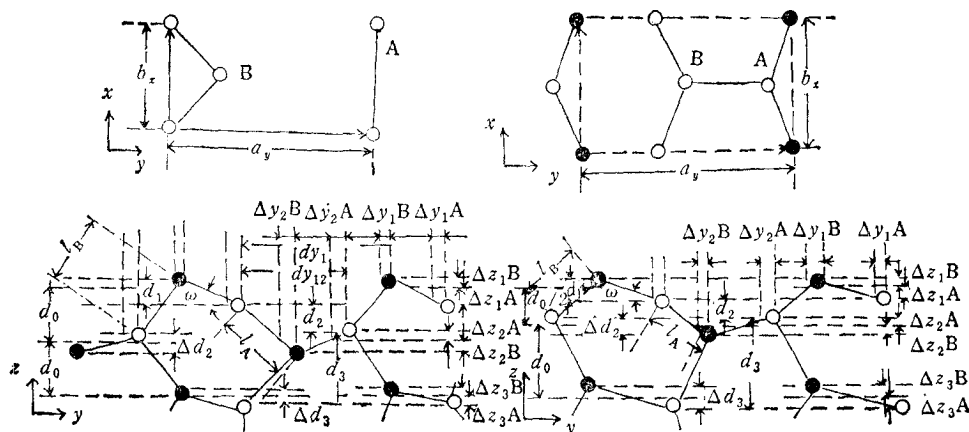
一、引 言

Duke 和 Paton 等人已对 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}$ 0)表面的结构进行过研究^[1-18]. 但随作者采用的方法不同, 所提出的结构参数彼此差别较大. 更不能从这些结果中找出规律性的数据来.

本文采用自建的低能电子衍射动力学 (LEED) 理论的能带近似法^[21, 22], 分别研究了 IIIA-VA 化合物 AlP(110), InP(110), GaP(110), InAs(110), GaAs(110) 和 GaSb(110), IIB-VIA 化合物 α -ZnS 型的 ZnS(110), ZnSe(110), ZnTe(110) 和 CdTe(110), 以及 β -ZnS 型的 ZnO(10 $\bar{1}$ 0), CdSe(10 $\bar{1}$ 0) 表面的弛豫. 对这些 AB(110) 和 AB(10 $\bar{1}$ 0) 表面, 设表面上的 A—B 键长保持不变, 用一旋转角 ω , 使 B 原(离)子向外移动, 而 A 原(离)子向内移动, 从而引起 A, B 的背键收缩或膨胀而形成表面三个原子层间距不相等的旋转弛豫结构. 通过对各表面不同束的理论计算与观测值的比较, 得到了精确的结构参数. 在比较分析各结构参数之后, 发现 A, B 原(离)子分别向内、外移动位置的代数和 d_1 值 (即弛豫量) 与它们的原(离)子半径之和 ($r_A + r_B$) 成正比, 并用离子极化理论说明其弛豫的机理和规律.

二、计算结果及与文献值的比较

根据各表面的 LEED 图所确定的 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)表面的原胞结构(见图 1(a)),弛豫后的表面结构(见图 1(b)),IIB-VIA化合物的(10 $\bar{1}0$)表面的原胞结构



(a) IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)表面原胞结构(顶视)
 (b) IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)弛豫后的表面结构(侧视)
 (c) IIB-VIA 化合物(10 $\bar{1}0$)表面原胞结构(顶视)
 (d) IIB-VIA 化合物(10 $\bar{1}0$)弛豫后的表面结构(侧视)

图1 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}0$)表面结构图

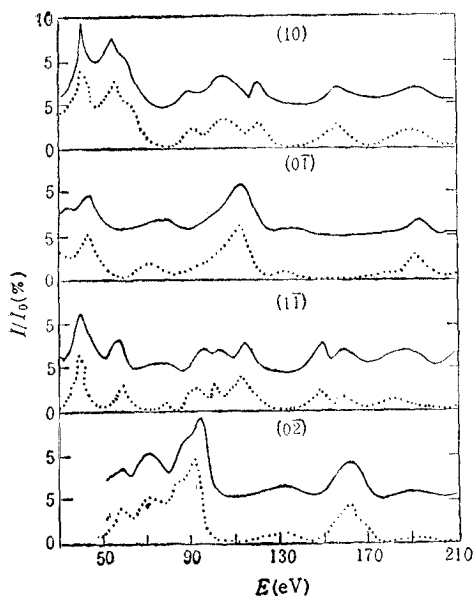


图2 AlP (110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.640 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.300 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.960 \text{ \AA}$; (0 $\bar{1}$)束: $d_1 = 0.640 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.300 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.980 \text{ \AA}$; (1 $\bar{1}$)束: $d_1 = 0.640 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.300 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.980 \text{ \AA}$; (0 $\bar{2}$)束: $d_1 = 0.640 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.300 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.980 \text{ \AA}$

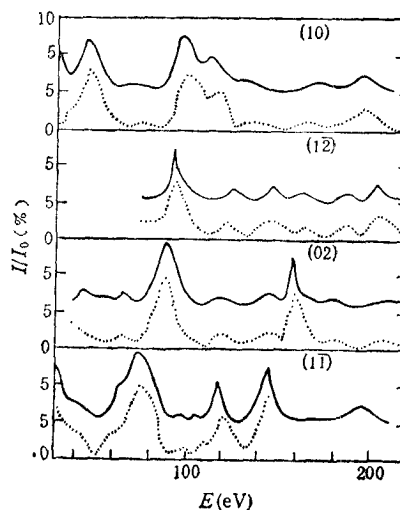


图3 GaP(110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.610 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.460 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.910 \text{ \AA}$; (1 $\bar{2}$)束: $d_1 = 0.600 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.510 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.930 \text{ \AA}$; (0 $\bar{2}$)束: $d_1 = 0.620 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.470 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.920 \text{ \AA}$; (1 $\bar{1}$)束: $d_1 = 0.630 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.490 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.920 \text{ \AA}$

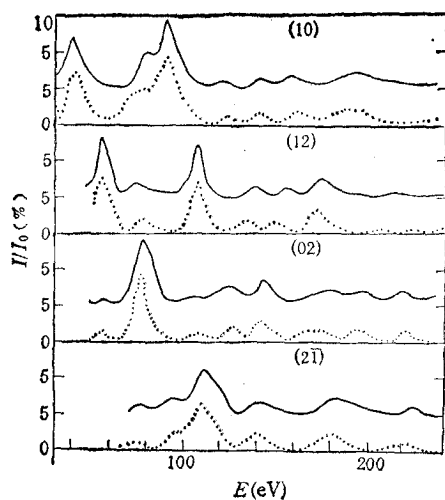


图4 InP(110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.670 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.570 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.000 \text{ \AA}$; (12)束: $d_1 = 0.690 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.480 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.100 \text{ \AA}$; (02)束: $d_1 = 0.670 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.550 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.100 \text{ \AA}$; ($2\bar{1}$)束: $d_1 = 0.670 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.550 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.050 \text{ \AA}$

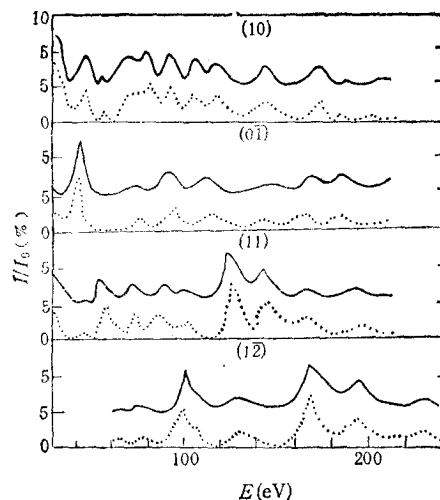


图5 InAs(110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.820 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.260 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.080 \text{ \AA}$; ($0\bar{1}$)束: $d_1 = 0.820 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.220 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.100 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.800 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.270 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.140 \text{ \AA}$; ($1\bar{2}$)束: $d_1 = 0.800 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.510 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.140 \text{ \AA}$

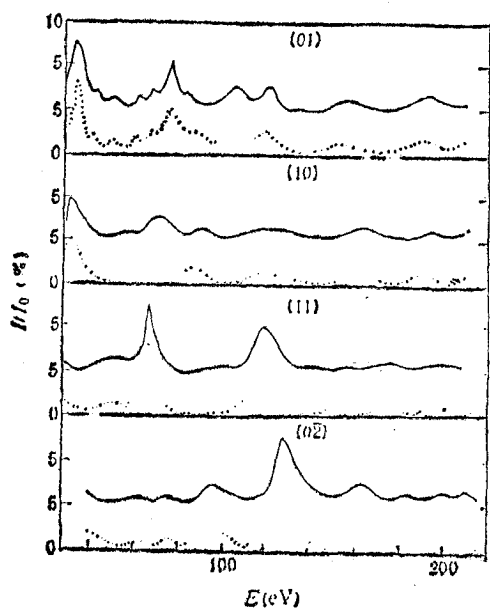


图6 GaSb(110) 弛豫表面 (01)束: $d_1 = 0.810 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.635 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.180 \text{ \AA}$; (10)束: $d_1 = 0.860 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.615 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.180 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.810 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.615 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.180 \text{ \AA}$; ($0\bar{2}$)束: $d_1 = 0.805 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.615 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.200 \text{ \AA}$

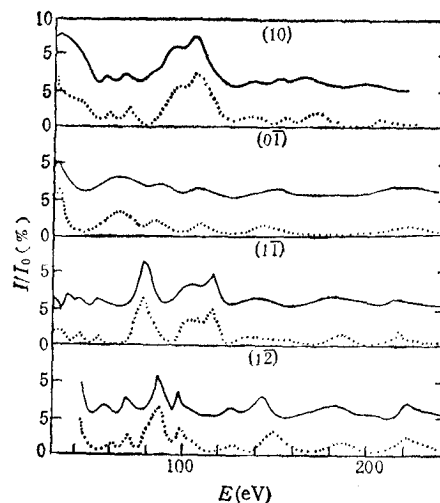


图7 InSb(110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.730 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.580 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.400 \text{ \AA}$; ($0\bar{1}$)束: $d_1 = 0.750 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.650 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.400 \text{ \AA}$; ($1\bar{1}$)束: $d_1 = 0.730 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.660 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.440 \text{ \AA}$; ($1\bar{2}$)束: $d_1 = 0.730 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.600 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.460 \text{ \AA}$

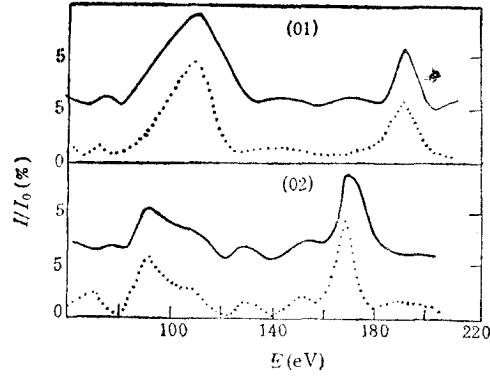


图8 ZnS(110) 弛豫表面 (01)束: $d_1 = 0.536 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.700 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.980 \text{ \AA}$; (02)束: $d_1 = 0.536 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.700 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.080 \text{ \AA}$

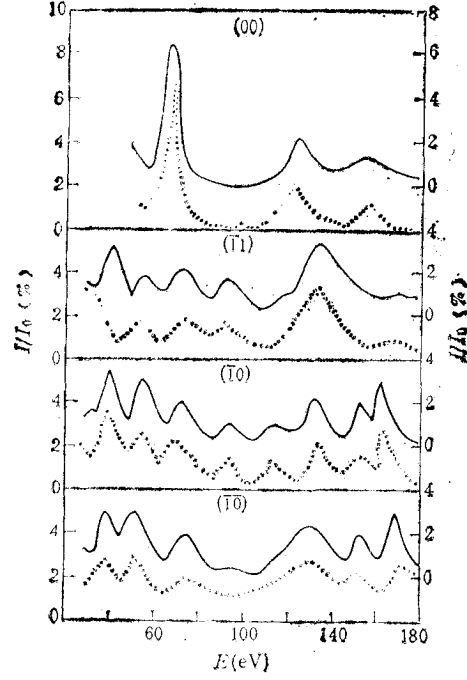


图9 ZnSe(110) 弛豫表面 (00)束: $d_1 = 0.760 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.430 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.160 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.770 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.400 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.220 \text{ \AA}$; (10)束: $d_1 = 0.774 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.430 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.220 \text{ \AA}$; (1-0)束: $d_1 = 0.780 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.400 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.220 \text{ \AA}$

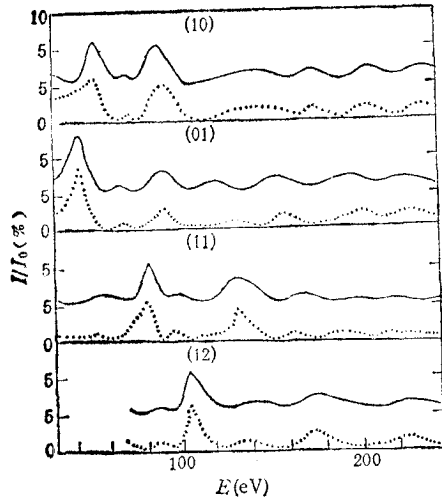


图10 ZnTe(110) 弛豫表面 (10)束: $d_1 = 0.780 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.640 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.170 \text{ \AA}$; (01)束: $d_1 = 0.780 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.660 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.170 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.780 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.660 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.170 \text{ \AA}$; (12)束: $d_1 = 0.780 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.640 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.100 \text{ \AA}$

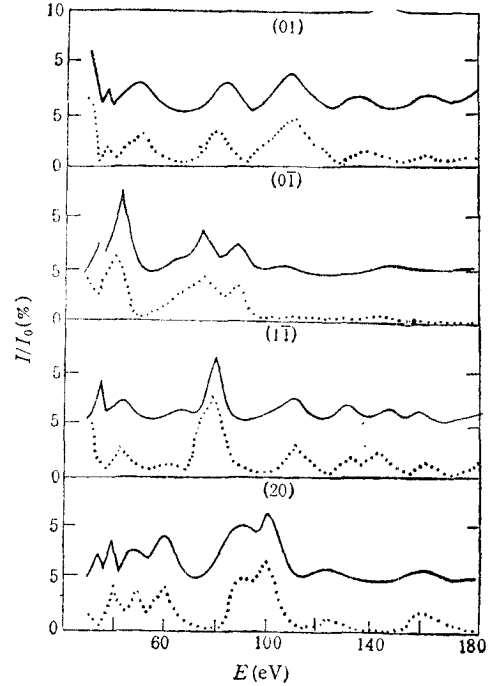


图11 CdTe(110) 弛豫表面 (01)束: $d_1 = 0.830 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.700 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.240 \text{ \AA}$; (0-1)束: $d_1 = 0.830 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.700 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.240 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.830 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.680 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.260 \text{ \AA}$; (20)束: $d_1 = 0.820 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.640 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.220 \text{ \AA}$

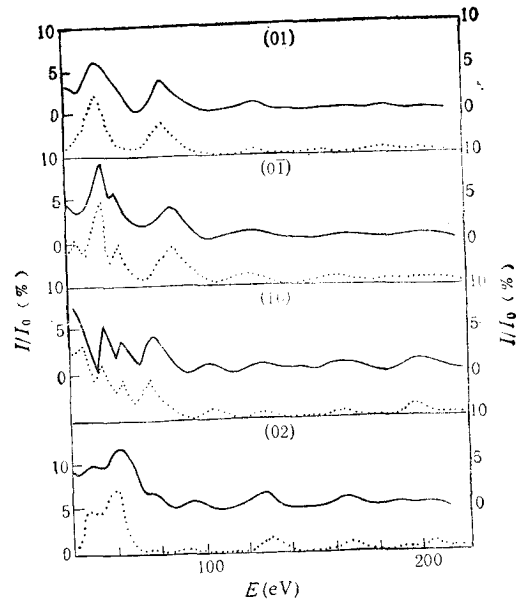


图 12 CdSe(10 $\bar{1}$ 0)弛豫表面 (01)束: $d_1 = 1.070 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.916 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.440 \text{ \AA}$; (0 $\bar{1}$)束: $d_1 = 1.070 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.916 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.440 \text{ \AA}$; ($\bar{1}$ 0)束: $d_1 = 1.070 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.990 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.440 \text{ \AA}$; (02)束: $d_1 = 1.040 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.916 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.440 \text{ \AA}$

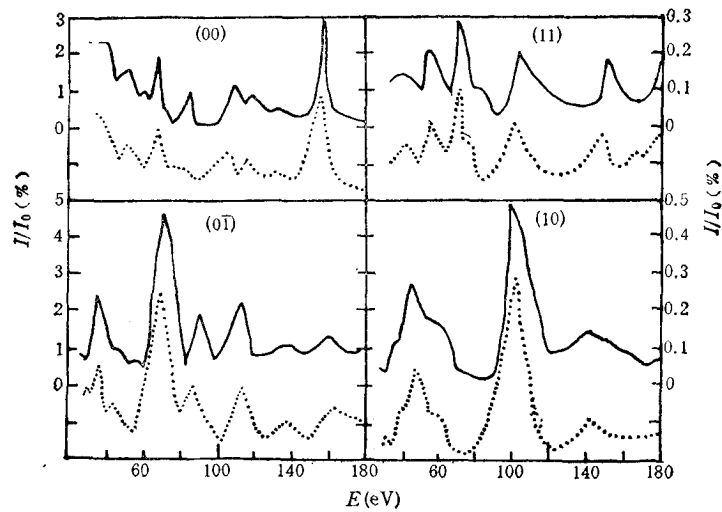


图 13 ZnO(10 $\bar{1}$ 0)弛豫表面 (00)束: $d_1 = 0.630 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.700 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.920 \text{ \AA}$; (11)束: $d_1 = 0.640 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.850 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.980 \text{ \AA}$; (0 $\bar{1}$)束: $d_1 = 0.630 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.810 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.900 \text{ \AA}$; (10)束: $d_1 = 0.630 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.880 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.840 \text{ \AA}$

(见图 1(c)), 弛豫后的表面结构(见图 1(d)), 以及观测各束 LEED 谱的实验条件, 将有关参数分别代入本理论的镜象束^[21]与非镜象束公式^[22], 采用自编 FORTRAN 程序, 在 VAX 11/780 机上对各表面的各束理论计算的 LEED 谱(实线)与观测值(虚线)的比较, 见图 2 至图 13。

表1 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}0$)弛豫表面的结构参数(平均值,单位为Å)

表 面	原子位置移动			d_1	d_2	d_3	Δd_1	Δd_2	Δd_3	d_{y_1}	$d_{y_{12}}$	$\omega(^{\circ})$	I_A (弛豫量%)	I_B (弛豫量%)	a_z^*
	Δ	B	A												
IIIA-VA 化合物(110)表面															
AlP(110) (7 束平均)	Δz_1	0.060±0.008	-0.577±0.005	0.640±0.001	1.300±0.001	1.977±0.066 至 0.003 0.106	0	0	0	4.247±0.001	3.045±0.001	28.02±0.01	2.189±(-7.3) 0.006	2.282±(-3.3) 0.001	5.450
GaP(110) (8 束平均)	Δz_1	0.18±0.02	-0.44±0.01	0.618±0.006	1.49±0.02	1.914±0.007 至 0.007 0.027	0	0	0	4.237±0.003	3.022±0.006	26.94±0.29	2.24±(-5.1) 0.01	2.43±(3.0) 0.01	5.451
InP(110) (8 束平均)	Δz_1	0.15±0.04	-0.53±0.04	0.68±0.01	1.55±0.03	2.06±0.005 至 0.03 0.075	0	0	0	4.567±0.005	3.27±0.01	27.45±0.46	2.40±(-5.4) 0.02	2.58±(1.7) 0.03	5.869
InAs(110) (8 束平均)	Δz_1	0.14±0.09	-0.67±0.09	0.809±0.006	1.38±0.09	2.10±0.012 至 0.04 0.188	0 至 0.2	0	0	4.76±0.004	3.495±0.008	32.41±0.39	2.48±(-5.3) 0.05	2.5±(-3.9) 0.1	6.036
GaSb(110) (7 束平均)	Δz_1	0.29±0.01	-0.53±0.02	0.81±0.01	1.63±0.01	2.180±0.006 至 0.006 0.034	0	0	0	4.823±0.007	3.53±0.01	32.2±0.4	2.60±(-1.3) 0.007	2.76±(4.3) 0.01	6.118
InSb(110) (7 束平均)	Δz_1	0.15±0.04	-0.54±0.04	0.736±0.003	1.61±0.01	2.43±0.12 至 0.02 0.24	0.10	0	0	5.036±0.003	3.59±0.01	27.01±0.2	2.66±(-5.1) 0.02	2.76±(-1.7) 0.02	6.478
IIB-VIA 化合物(110)表面															
ZnS(110) (2 束平均)	Δz_1	0.327±0.001	-0.209±0.001	0.536±0.001	1.700±0.001	2.02±0.04	0.13 至 0.27	0.006	0	4.167±0.001	2.925±0.001	23.35±0.01	2.321±(-0.9) 0.001	2.558±(9.2) 0.001	5.409
ZnSe(110) (6 束平均)	Δz_1	0.31±0.02	-0.46±0.02	0.770±0.006	1.43±0.02	2.20±0.02	0.1 至 0.2	0.212 至 0.252	0	4.478±0.003	3.289±0.003	32.90±0.31	2.50±(22.4) 0.01	2.50±(22.2) 0.01	5.668
ZnTe(110) (7 束平均)	Δz_1	0.30±0.02	-0.48±0.02	0.780±0.001	1.65±0.01	2.15±0.03	0	0.034 至 0.106	0	4.782±0.001	3.745±0.001	30.28±0.01	2.59±(-1.8) 0.02	2.76±(4.6) 0.01	6.089
CdTe(110) (8 束平均)	Δz_1	0.26±0.02	-0.57±0.02	0.825±0.006	1.68±0.01	2.25±0.02	0	0.018 至 0.071	0	5.086±0.003	3.692±0.006	30.61±0.2	2.70±(-3.9) 0.01	2.87±(2.3) 0.01	6.480
IIB-VIA 化合物(10 $\bar{1}0$)表面															
ZnO(10 $\bar{1}0$) (6 束平均)	Δz_1	0.09±0.05	-0.55±0.07	0.633±0.004	0.82±0.04	1.91±0.014 至 0.04 0.206	0	0	0	3.415±0.008	2.93±0.02	18.55±0.13	1.47±(-26.2) 0.06	1.53±(-23.1) 0.05	5.310
CdSe(10 $\bar{1}0$) (7 束平均)	Δz_1	0.80±0.02	-0.27±0.02	1.06±0.01	0.93±0.02	2.440±0.084 0.001	0	0	0	4.613±0.006	3.73±0.02	23.84±0.33	2.71±(2.8) 0.03	2.18±(-17) 0.02	7.020

* a_z 为衬底晶胞常数; $d_0 = a_z/2\sqrt{2}$ (衬底层间距); $I_{A-B} = \frac{a_z\sqrt{3}}{4}$ [衬底的 A-B 键长对(110)]; $I_{A-B} = 0.375 \times a_z$ [对(10 $\bar{1}0$)].

表2 结果比较(单位为Å)

比 较	d_1	d_2	d_3	$\omega(^{\circ})$	I_{A-B} (弛豫量%)	I_A (弛豫量%)	I_B (弛豫量%)
本文结果 文献[1]	0.640±0.001 0.63	1.300±0.001 1.327	1.977±0.001 1.962	AlP(110) 28.02±0.01 27.5±3	2.360(≈0) (0)	2.189±0.006(-7.3) (2.36)	2.282±0.001(-3.3) (-6.03)
本文结果 文献[2] 文献[3]	0.618±0.001 0.63 0.62	1.49±0.02 1.386 1.467	1.914±0.007 1.927 2.007	GaP(110) 26.94±0.29 27.54 27.07	2.360(≈0) (0) (-1.5)	2.240±0.001(-5.1) (-2.61) (-1.92)	2.43±0.01(3.0) (-3.78) (1.42)
本文结果 文献[4] 文献[5] 文献[6]	0.68±0.01 0.69 0.69 0.643	1.55±0.03 1.411 1.380 1.533	2.06±0.03 2.109 2.140 2.190	InP(110) 27.45±0.46 30.4 28.0 26.5	2.541(≈0) (-2.26) (0) (-0.54)	2.40±0.02(-5.4) (-2.66) (-1.93) (-2.05)	2.58±0.03(1.7) (-3.98) (-7.31) (-1.28)
本文结果 文献[7]	0.809±0.006 0.78	1.38±0.09 1.49	2.10±0.04 2.209	InAs(110) 32.41±0.39 31.0	2.614(≈0) (0)	2.48±0.05(-5.3) (1.73)	2.5±0.1(-3.9) (-2.57)
本文结果 文献[8]	0.81±0.01 0.77	1.63±0.01 1.615	2.180±0.006 2.163	GaSb(110) 32.2±0.2 30.2	2.649(≈0) (0)	2.600±0.007(-1.3) (-0.03)	2.76±0.01(4.3) (0)
本文结果 文献[9] 文献[10] 文献[6]	0.736±0.003 0.781 0.830 0.692	1.61±0.03 1.597 1.481 1.707	2.43±0.02 2.381 2.401 2.417	InSb(110) 27.01±0.2 28.8 27.1 25.7	2.805(≈0) (0.01) (4.31) (-0.55)	2.66±0.02(-5.1) (0.92) (-18.8) (-2.26)	2.76±0.02(-1.7) (-4.47) (0.57) (-0.83)
本文结果 文献[11]	0.536±0.001 0.55	1.700±0.001	2.02±0.02	ZnS(110) 23.35±0.01 24.0	2.342(≈0) (2.72)	2.321±0.001(-0.9) (-11.8)	2.598±0.001(9.2) (4.67)
本文结果 文献[12]	0.770±0.006 0.703	1.43±0.02 1.406	2.20±0.02	ZnSe(110) 32.9±0.31	2.044(≈0)	2.50±0.01(22.4)	2.50±0.01(22.2)
本文结果 文献[13] 文献[14] 文献[6]	0.780±0.001 0.715 0.750 0.674	1.65±0.01 1.575 1.603 1.432	2.15±0.03 2.187 2.153 2.310	ZnTe(110) 30.82±0.01 28.0 33.25 27.53	2.637(≈0) (0.01) (-3.25) (-1.36)	2.59±0.02(-1.8) (-0.58) (-0.34) (-6.0)	2.76±0.01(4.6) (-2.25) (-2.72) (-3.93)
本文结果 文献[15]	0.825±0.005 0.82	1.68±0.01 1.56	2.25±0.02 2.38	CdTe(110) 30.61±0.2 30.5	2.806(≈0) (0)	2.70±0.01(-3.9) (0.78)	2.87±0.01(2.3) (-4.57)
本文结果 文献[16] 文献[17]	0.633±0.004 0.2 0.1	0.82±0.04 0.84	1.91±0.04	ZnO(10 $\bar{1}0$) 18.55±0.13	1.991(≈0)	1.47±0.06(-26.2)	1.53±0.05(-23.1)
本文结果 文献[18]	1.06±0.01 1.03	0.93±0.02 0.41	2.440±0.001 2.48	>至21 CdSe(10 $\bar{1}0$) 23.84±0.33 23	2.630(≈0)	2.71±0.03(2.8)	2.44±0.03(-7.4)

与图 2 至图 13 相应的各表面结构参数(如表面 A, B 原(离)子的位置移动 $\Delta z_n, \Delta y_n$, 各层间距 d_n 及其改变量 Δd_n , 旋转角 ω , 背键长 l_A 与 l_B 等)的平均值, 见图 1(b)和(d)以及表 1.

本文理论计算两类化合物(110)和(1010) 弛豫表面的主要结构参数与文献值^[1-18]的比较, 见表 2.

从表 2 可知, 对 AlP(110) 弛豫表面, 本文结果与文献[1]相近; 对 GaP(110) 与文献[3]相近; 对 InP(110) 与文献[5]符合较好; 对 InAs(110) 与文献[7]近似; 对 GaSb(110) 与文献[8]近似; 对 InSb(110) 与文献[9]符合较好, 但与文献[6, 10]差别较大; 对 ZnS(110)与文献[11]符合较好; 对 ZnSe(110)与文献[12]基本一致; 对 ZnTe(110)与文献[13]相近, 但与文献[6, 14]相差较大; 对 CdTe(110)与文献[15]符合得很好; 对 ZnO(1010)与文献[17]基本一致, 但与文献[16]相差较大; 对 CdSe(1010)与文献[18]符合得很好.

三、讨 论

IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物是属于 ZnS 型的过渡型(由离子晶体向共价晶体过渡)晶体, 它们的(110)和(1010)表面, 离子晶体的表面特征显著, 表面上的悬挂键基本消失, 至今未发现重构现象. 但这些表面总是弛豫的, 当这些表面发生弛豫时用离子极化理论来说明其弛豫机理和规律较为方便. 即当晶体的(110)和(1010)表面方向的第三维周期被终断后, 在表面势的极化以及 A, B 原(离)子的相互极化下, 由于 B 原(离)子的变形性较大, 极化力较弱, 被极化后半半径增大故向外移动; 而 A 原(离)子的变形性小, 极化力较强, 在极化过程中半径减小, 故向内移动; 极化后表面上的 A—B 键型本应由离子型向共价型过渡, 但这些晶体的 A—B 键已有明显的共价性, 故被极化后, 表面上的键型和键长(l_{A-B})应基本不变, 只是由于 A, B 原(离)子分别向内、外移动形成了一定的旋转角, 并引起表面上的 A, B 原(离)子的背键(l_A 和 l_B)分别有一定程度的膨胀和收缩, 从而形成表面三个原子层间距不相等旋转弛豫结构.

比较分析各表面的结构参数后, 发现 A, B 原(离)子分别向内、外移动位置的代数和(即 d_1)分别与它们原(离)子的半径和($r_A + r_B$)成正比, 即 $d_1 \propto (r_A + r_B)$, 或 $d_1 = \alpha(r_A + r_B)$, 这里将比例系数 α 定义为弛豫率($\alpha\%$ 为百分弛豫率). IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(1010)各弛豫表面的 α 值以及它们的 d_1 与($r_A + r_B$)的关系见表 3.

1. IIIA-VA AB(110)弛豫表面的 α 值

由表 3 可知, 虽然各(110)弛豫表面的弛豫量 d_1 值各不相同, 但它们分别与原(离)子的半径和($r_A + r_B$)成正比, 其比值 α 近似于定值(0.24 ± 0.02). 此规律可用离子极化理论来说明. 因为 A, B 原(离)子的 d_1 值随极化率(或变形性)增大而增加, 而它们的极化率(或变形性)主要由它们的半径大小, 正、负电荷多少和外层电子构型三种因素决定(也与表面键型和衬底晶体类型有关). 对 IIIA-VA 各化合物的表面来说, 由于外层电子构型(18, 8)和正、负电荷数(3+, 3-)均相同, 故极化率(或变形性)只随($r_A + r_B$)增大而增

表3 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}0$)弛豫表面 d_1 值与 $(r_A + r_B)$ 的关系

表 面	d_1	B 半径*		A 半径*		(A + B)半径		α		$\alpha\%^{**}$	
		r_B (原)	r_B (离)	r_A (原)	r_A (离)	$(r_A + r_B)_{原}$	$(r_A + r_B)_{离}$	原子	离子	原子	离子
IIIA-VA(110)											
AlP(110)	0.640	1.28	2.12	1.43	0.50	2.71	2.62	0.236	0.244	23.6	24.4
GaP(110)	0.618	1.28	2.12	1.41	0.62	2.69	2.74	0.229	0.226	22.9	22.6
InP(110)	0.680	1.28	2.12	1.66	0.81	2.94	2.93	0.231	0.232	23.1	23.2
GaAs(110) ^[17]	0.650	1.39	2.22	1.41	0.62	2.80	2.84	0.232	0.229	23.2	22.9
InAs(110)	0.809	1.39	2.22	1.66	0.81	3.05	3.03	0.265	0.267	26.5	26.7
GaSb(110)	0.810	1.59	2.45	1.41	0.62	3.03	3.07	0.270	0.264	27.0	26.4
InSb(110)	0.736	1.59	2.45	1.66	0.81	3.25	3.26	0.226	0.227	22.6	22.7
平均值						2.9 ± 0.2	2.9 ± 0.2	0.24 ± 0.02	0.24 ± 0.02	24 ± 2	24 ± 2
IIB-VIA(110)											
ZnS(110)	0.536	1.27	1.84	1.38	0.74	2.65	2.58	0.202	0.207	20.2	20.7
ZnSe(110)	0.770	1.40	1.98	1.38	0.74	2.78	2.72	0.278	0.283	27.8	28.3
ZnTe(110)	0.780	1.60	2.21	1.38	0.74	2.98	2.93	0.262	0.264	26.2	26.4
CdTe(110)	0.824	1.60	2.21	1.54	0.97	3.14	3.18	0.262	0.259	26.2	25.9
平均值						2.9 ± 0.2	2.9 ± 0.2	0.25 ± 0.02	0.25 ± 0.2	25 ± 2	25 ± 2
IIB-VIA(10 $\bar{1}0$)											
ZnO(10 $\bar{1}0$)	0.633	0.73(共)	1.40	1.38	0.74	2.11	2.14	0.300	0.296	30.0	29.6
CdSe(10 $\bar{1}0$)	1.06	1.40	1.98	1.54	0.97	2.94	2.95	0.361	0.359	36.1	35.9
平均值						2.5 ± 0.4	2.5 ± 0.4	0.33 ± 0.03	0.33 ± 0.03	33 ± 3	33 ± 3

* A, B 原(离)子半径值取自文献[20]; ** $\alpha\% = d_1 / (r_A + r_B) \times 100\%$

加, d_1 与 $(r_A + r_B)$ 成正比, 而比值 α 近似于定值。

2. IIB-VIA 化合物(110)和 (10 $\bar{1}0$) 弛豫表面的 α 值

由表 3 可知, IIB-VIA 化合物(110)和 (10 $\bar{1}0$) 弛豫表面的弛豫量 d_1 也与 $(r_A + r_B)$ 成正比, 其 α 值都近似于定值(0.25 ± 2 和 0.33 ± 3)。这些规律都可根据离子极化理论, 采用上述相同方法来说明。

3. IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和 (10 $\bar{1}0$) 弛豫表面 α 值的比较

在比较 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}0$)弛豫表面的 α 值的相对大小时, 除了考虑它们的原(离)子半径大小, 正、负电荷多少和外层电子构型外, 还必须考虑到表面 A—B 键型和衬底晶体类型对它们的影响(见表 4)。

从表 4 可知, 三类不同表面的 A, B 原(离)子的外层电子构型相同, 半径之和很相近, 正、负电荷数差别又很小, 因此它们对 α 值的影响很小。但三类表面的键型和衬底的晶体类型差别较大, 因此对 α 值影响较大。对 IIIA-VA 化合物(110)弛豫表面来说, 表面是典型的共价键而衬底为面心立方体表面基矢较小, 故变形性最小, α 值也最小; 对 IIB-VIA 化合物(110)弛豫表面, 虽然表面的过渡型键易变形, 但衬底为面心立方体表面基矢较小, 不

表4 IIIA-VA 和IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}$ 0)弛豫表面 α 值的比较

表 面	(A + B)半径		正、负电荷 z		外层电子构型		表面键型	衬底晶体 类型	变形性	α
	$(r_A + r_B)_{原}$	$(r_A + r_B)_{离}$	A	B	A	B				
IIIA-VA(110)	2.9 ± 0.2	2.9 ± 0.2	A ³⁺	B ³⁻	18	8	共价型	面心立方	较小	0.24 ± 0.02
IIB-VIA(110)	2.9 ± 0.2	2.9 ± 0.2	A ²⁺	B ²⁻	18	8	过渡型	面心立方	较大	0.25 ± 0.02
IIB-VI(10 $\bar{1}$ 0)	2.5 ± 0.4	2.5 ± 0.4	A ²⁺	B ²⁻	18	8	过渡型	六方	最大	0.33 ± 0.03

易变形,两种因素综合的结果,变形性居中,故 α 值较大;对 IIB-VIA 化合物弛豫表面,除表面为过渡型键易变形而外,衬底为六方晶体,表面基矢最大也易变形,故 α 值最大。

综上所述,本文对 IIIA-VA 和 IIB-VIA 化合物(110)和(10 $\bar{1}$ 0)表面所提出的保持表面 A—B 键长不变的旋转模型和机理以及各表面的弛豫量 d_i 分别与它们的原(离)子半径之和成正比的定量关系,都可用离子极化理论来说明。

- [1] C. B. Duke, A. Paton, A. Kahn and C. R. Bonapace, *Phys. Rev.*, **B28**(1981), 852.
- [2] C. B. Duke, A. Paton, W. K. Ford, A. Kahn and J. Carilli, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 562.
- [3] D. J. Miller and D. Haneman, *Surf. Sci.*, **82**(1979), 102.
- [4] R. J. Meyer, C. B. Duke, A. Paton, J. C. Tsang, J. L. Yeh, A. Kahn and P. Mark, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 6171.
- [5] C. B. Duke, R. J. Meyer and P. Mark, *J. Vac. Sci. Technol.*, **17**(1980), 971.
- [6] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.*, **41**(1978), 1026; *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 2074.
- [7] C. B. Duke, A. Paton, A. Kahn and C. R. Bonapace, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 6189.
- [8] C. B. Duke, A. Paton and A. Kahn, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3436.
- [9] R. J. Meyer, C. B. Duke, A. Paton, J. L. Yeh, J. C. Tsang, A. Kahn and P. Mark, *Phys. Rev.*, **B21**(1980), 4740.
- [10] C. B. Duke, R. J. Meyer, A. Paton, J. L. Yeh, J. C. Tsang, A. Kahn and P. Mark, *J. Vac. Sci. Technol.*, **17**(1980), 501.
- [11] C. B. Duke, R. J. Meyer, A. Paton, A. Kahn, J. Carilli and J. L. Yeh, *J. Vac. Sci. Technol.*, **18**(1981), 866.
- [12] P. Mark, G. Sibneros, M. Bonn, A. Kahn, C. B. Duke, A. Paton and A. R. Luinsky, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**(1977), 910.
- [13] C. B. Duke, A. Paton and A. Kahn, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A1**(1983), 672.
- [14] R. J. Meyer, C. B. Duke, A. Paton, E. So, J. L. Yeh, A. Kahn and P. Mark, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 2875.
- [15] C. B. Duke, A. Paton, W. K. Ford, A. Kahn and G. Scott, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 3310.
- [16] C. B. Duke, A. R. Lubinsky, S. C. Chang, B. W. Lee and P. Mark, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 4865.
- [17] A. R. Lubinsky, C. B. Duke, S. C. Chang, B. W. Lee and P. Mark, *J. Vac. Sci. Technol.*, **13**(1976), 189.
- [18] C. B. Duke, A. Paton, Y. R. Wang, K. Stiles and A. Kahn, *Surf. Sci.*, **197**(1988), 11.
- [19] 蓝田、徐飞岳,物理学报,**32**(1989),357.
- [20] Periodic Table of the Elements Table of Periodic Properties of the Elements, Sargent-Welch Scientific Company U. S. A. (1968), fifth edition.
- [21] 蓝田、徐飞岳,原子与分子物理学报,**5**(1988),741.
- [22] 蓝田、徐飞岳,化学学报,**47**(1989),112.

A STUDY OF IIIA-VA AND IIB-VIA COMPOUNDS AB(110) AND AB(10 $\bar{1}$ 0) SURFACE RELAXATION WITH LOW-ENERGY-ELECTRON DIFFRACTION

LAN TIAN XU FIE-YUE

Department of Chemistry, University Electronics Science and Technology, Chengdu, 610054

(Received 4 May 1989)

ABSTRACT

We have studied the relaxation of IIIA-VIA and IIB-VIA compounds AB (110) and AB (10 $\bar{1}$ 0) surfaces with LEED, and found that the best agreement between theory and experiment occurs in such a structure, in which the B atoms are tilted outward and A atoms are tilted inward, with an angle of rotation ω , keeping the bond length at surface A-B unchanged, and the first atomic surfaces layer distances $d_1 = 0.610 - 0.810 \text{ \AA}$ [for IIIA-VA (110)], $0.536 - 0.825 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (110)] and $0.633 - 1.060 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (10 $\bar{1}$ 0)] and the second surfaces atomic layer distances $d_2 = 1.300 - 1.610 \text{ \AA}$ [for IIIA-VA (110)], $1.430 - 1.700 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (110)] and $0.820 - 0.930 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (10 $\bar{1}$ 0)] and third one $d_3 = 1.410 - 2.440 \text{ \AA}$ [for IIIA-VA (110)], $2.020 - 2.250 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (110)] and $1.910 - 2.440 \text{ \AA}$ [for IIB-VIA (10 $\bar{1}$ 0)]. For this structure the relaxation susceptibility α are: 0.24 ± 0.02 [for IIIA-VA (110)], 0.25 ± 0.02 [for IIB-VIA (110)] and 0.33 ± 0.03 [for IIB-VIA (10 $\bar{1}$ 0)].

PACC: 6144H; 6820; 6830; 7510L