

ZnS(111) 表面电子结构研究^{*}

班大雁 张海峰[†] 李永平^{††} 方容川

(中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

(1995 年 6 月 22 日收到; 1995 年 9 月 6 日收到修改稿)

利用 Muffin-Tin 轨道线性组合(LMTO)法, 采用 slab 模型计算了半导体 ZnS(111) 表面的电子结构, 给出了总体、局域及分波态密度, 分析了两种 slab 模型的表面稳定性和表面态. 理论态密度曲线与 ZnS(111) 表面同步辐射光电子能谱相符合.

PACC: 7320

1 引 言

II-VI 族半导体因其具有优良的光敏探测及高效可见发光特性而受到广泛重视^[1-3]. ZnS 是 II-VI 族半导体中禁带宽度最大的直接带隙材料. 由于室温下 ZnS 有较大的激子束缚能, 并且其禁带宽度达 3.6 eV^[4], 所以不仅可用于超晶格真空紫外光探测器及光抽运激光器的制造^[5-7], 而且也能够用于制造蓝光波段的光电器件, 在平板显示领域有着广阔的应用前景, 近年来人们对于宽禁带的 II-VI 族单晶半导体的研究兴趣日渐浓厚起来, 对于 ZnS 半导体的电子结构已有一些理论计算^[8-12], 但这些研究主要集中在其体态和非极性表面电子结构上, 对于极性表面的电子结构, 我们目前还未见有关理论和实验方面的报道.

材料的表界面电子结构与体态的有很大的区别, 表现出许多不同的特征, 如表面局域态、共振态, 而这些性质是与其构成的光电器件的性能及质量密切相关的, 因此对于材料表面、界面的电子结构特性研究, 无论从实验上还是从理论上都是深入了解材料的物理性质和化学性质所不可缺少的^[13].

本文一方面采用同步辐射光源测量 ZnS(111) 表面光电子能谱, 另一方面利用改进的 LMTO 方法^[14]研究 ZnS(111) 的两类表面电子结构, 给出 slab 模型的总体、局域及分波态密度, 分析了表面态及其构成, 理论计算出的态密度与实验测得的价带谱符合较好. 通过理论与实验对比分析, 指出实验中 ZnS 样品(111) 表面可能存在的构型.

2 实 验 结 果

ZnS(111) 单晶是用闭管碘蒸汽输运方法生长的, 样品在传递进超高真空预备室之

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

[†] 现工作单位: 北京钢铁研究总院二室, 北京 100081.

^{††} 中国科学技术大学结构分析开放研究实验室, 合肥 230026.

前,表面经机械抛光,然后用超声波清洗,以去除样品表面氧化层及表面缺陷.样品在超高真空中,由 900 eV 氩离子刻蚀约 10 min 和 400 ℃ 退火 12 min 进行循环处理,直到出现明锐的低能电子衍射 (LEED) 花样,确定为 ZnS(111) 的 (1×1) 或 (2×2) 表面,用 X 射线光电子能谱 (XPS) 测量样品表面,没有发现碳和氧的信号,表明样品表面清洁有序.实验是在合肥国家同步辐射实验室光电子能谱站进行的.激发光是从同步辐射 800 MeV 电子储存环引出,所用的光子能量为 100 eV,单色性优于 $E/\Delta E=500$. 测量室的背底真空优于 6.7×10^{-8} Pa. 实验测量的 ZnS(111) 表面光电子能谱见图 1 曲线 a. 从图 1 中明显可见有两个峰,分别标为 H 和 M, 它们的强度最大值处位于价带顶下约 -1.50 和 -5.0 eV 处 (实验曲线以价带顶为能量零点,理论曲线以费密能级为能量零点,以下均同), 其中 M 峰较弱且窄, 而 H 峰则较强且较宽, 并有一些细致结构. 图 1 中还给出了理论计算得出的 ZnS(111) 表面态密度曲线 (图 1 曲线 b 为单悬键 Zn 表面, 图 1 曲线 c 为单悬键 S 表面).

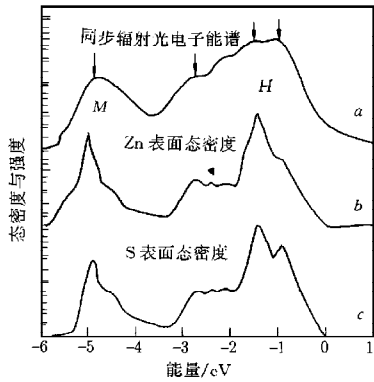


图 1 曲线 a 为 ZnS(111) 表面同步辐射光电子能谱; 曲线 b 为 ZnS(111) 单悬键 Zn 表面总态密度曲线; 曲线 c 为 ZnS(111) 单悬键 S 表面总态密度曲线

3 理论模型、方法与结果

3.1 理论模型与方法

闪锌矿结构的 ZnS 晶格常数为 0.5409 nm. 在体态电子结构计算中, 每个初基原胞内有一个 Zn 原子, 一个 S 原子. 在表面电子结构研究中, 采用 slab 模型来近似处理半无限大的晶体, 即取一定厚度的晶体原子层和一定厚度的真空层在垂直于二维平面方向上周期重复排列而成. ZnS(111) 表面原子排布有 A 类和 B 类之分, 如图 2 所示.

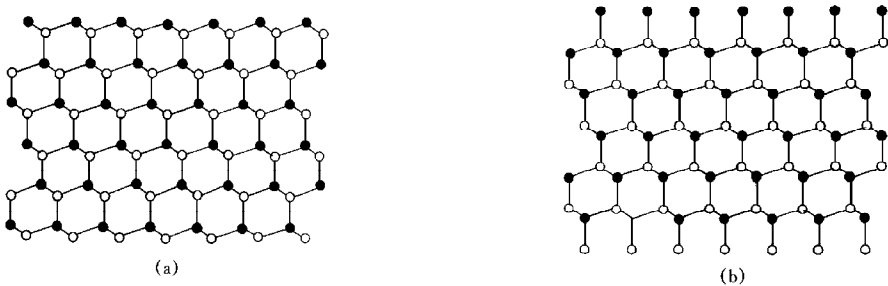


图 2 表面电子结构理论计算所用模型 A 原子排布(a)和模型 B 原子排布(b)的 slab 示意图 ●为 Zn 原子;○为 S 原子

形成这两类表面的 slab 模型中不仅总的原子数相同, 同种原子个数也相同. 在仅考虑

近邻成键情况下,slab 内层原子所处的环境结构相同,但表层原子的环境却有很大的区别.模型 A 中表层 Zn(S)与次表层的 S(Zn)原子成三键,只有一个悬挂键.模型 B 中表层 S(Zn)与次表层的 Zn(S)原子成一个键,而有三个悬挂键.

本文采用的自洽线性丸盒轨道原子球近似(LMTO-ASA)方法的详细描述,可以在很多的文献中见到^[15,16].在此仅说明与本文有关的方面.LMTO-ASA 方法仅适用于密堆积结构,对于开放的结构一般采用高对称位加入空球的方法.本文在 ZnS 体态电子结构研究中引入了与 Zn 和 S 原子总数相同的空球,以满足密堆积条件,在利用 slab 模型研究表面电子结构时,不仅 slab 原子层内要与体结构一样加入空球,而且在真空层区域也要用空球来模拟.

本文计算中角动量量子数 $l=0,1$,即仅取 Zn,S 原子的 s,p 分波来构成最小基列,同时采用“冻结芯”近似,Zn,S 及空球原子的半径均取 $r=0.1334$ nm 满足密堆积条件.在原子和晶体表面电子结构计算中,采用 Slater- $X\alpha$ 交换关联势, $\alpha=0.7$,该值使计算得出的禁带宽度与实验的数据可比拟.在体态和表面电子结构计算时,布里渊区内的 K 点分别取为 480 个和 384 个,没有引入原子球近似(ASA)修正.

3.2 闪锌矿结构 ZnS 体态理论计算结果

计算所得的体态闪锌矿结构的 ZnS 总体及分波态密度示于图 3,该计算结果与 potential variation mixed basis(缩写为 PVMB)等其它理论方法给出的结果符合,与实验也符合较好.见表 1.

表 1 Γ 点上几个能量值(单位为 eV)

	Γ_{1v}	Γ_{15v}	Γ_{1c}
本文	-13.05	0.0	3.01
PVMB ^[10]	-13.06	0.0	1.96
LCGO ^{[17]*}	-12.89	0.0	2.26
文献[9]	-12.61	0.0	2.47
实验值 ^[18]	—	—	3.6-3.8

* linear combination of gauss orbitals.

从图 3 中显示出价带区间分为较明显的三个峰,分别标为 H(0 到 -3.4 eV), M (-3.4 到 -5.6 eV), L (-11.2 到 -13.05 eV), H, M, L 分别表示态密度曲线高、中、低三处的峰,以下的图中将略去此标识. M 峰与 L 峰之间有一较宽的无能带分布区域,宽度为 5.6 eV.通过表 1 中 Γ 点的几个能量值的比较,可以看出本文的结果与 PVMB 等理论方法以及实验结果符合得较好,计算中由于采用了局域密度泛函理论,致使计算结果给出的带隙宽度比实验测量值偏小,但这可以通过在一定范围内调节 α 值给出与实验更加接近的能隙结果.

图 3 曲线 b—g 分别给出了 ZnS 中 Zn 与 S 原子的局域态密度及分波态密度,从图 3 曲线 b, e 可以看出 ZnS 总体态密度特征主要是由 S 原子的态密度特征体现的,这与每个 S 原子提供 6 个价电子而每个 Zn 原子只提供 2 个价电子是符合的,由于二者相互结合成键,因而无论 L, M 还是 H 峰,两元素的分波特征均有所体现.从分波态密度可以看出, L 峰主要是 S 原子的 s 分波贡献,只有少量的 Zn 原子的 s, p 分波成分,而 M 峰主要是 Zn

原子的 s 分波与 S 原子的 p 分波杂化所贡献. H 峰主要是 Zn 和 S 原子的 p 分波成分. 这与闪锌矿 CdTe 的结果^[19]类同.

3.3 两类表面的计算结果及表面稳定性分析

图 4 曲线 a, b 给出了 slab 模型中 A, B 两类 ZnS(111) 表面的总体态密度. 从图 4 可以看出两者均与图 3 曲线 a 中的 ZnS 体态总体态密度在外形包络上相似, 但由于表面的存在, 态密度在细致结构上有一定差别. 从图 4 曲线 a 与图 3 曲线 a 相比可以发现, H 峰变锐了许多并且左端出现了一个明显的平台, 能量区间从 $E = -2.82$ eV 到 $E = -2.00$ eV, H 峰右端有一个小尖峰, 另外在体态禁带和导带区间出现了一个明显表面态峰 $E = 4.00$ eV. 对于图 4 曲线 b 所示 B 类表面总体态密度, L 峰左端新出现一个小的肩峰, M 峰与 H 峰之间 $E = -2.82$ eV 处出现一个新峰, 更明显的变化是在费密能级附近. 可看出有一部分态延伸到对应体态态密度曲线的禁带中, 这些表面态分布对于材料的光、电性质有着重要影响. A, B 两类表面态密度存在一定区别的原因在于两种模型 slab 结构的不同, 特别是表层原子所处的环境不同而造成的, 模型 A 表层原子只有一个悬挂键, 而模型 B 中有三个悬挂键.

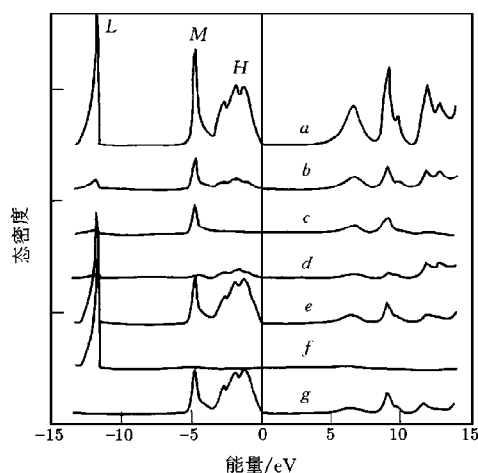


图 3 ZnS 的体态态密度 曲线 a 为体态总体态密度; 曲线 b 为 Zn 原子局域态密度; 曲线 c 为 Zn 原子 s 分波态密度; 曲线 d 为 Zn 原子 p 分波态密度; 曲线 e 为 S 原子局域态密度; 曲线 f 为 S 原子 s 分波态密度; 曲线 g 为 S 原子 p 分波态密度

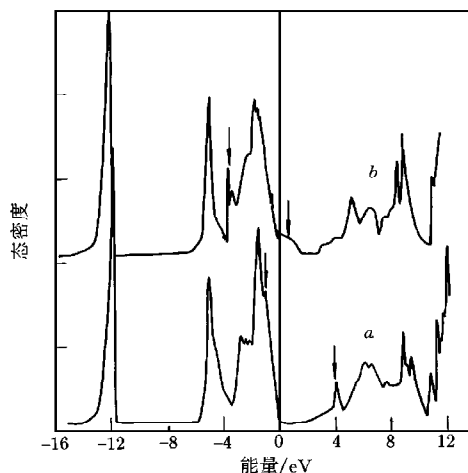


图 4 ZnS(111) 两类表面的总体态密度 曲线 a 为 A 模型; 曲线 b 为 B 模型

图 5 给出了模型 A 中 ZnS 表层及内层原子的局域分波态密度, 从图 5 中可以发现, M 峰出现的肩峰主要是因为表面 Zn 原子的 s 分波与体内 Zn 原子的 s 分波所处的能量位置不同而造成的, L 峰主要是由 S 原子的 s 分波贡献, 表面存在对此峰位置和形状影响不大, H 峰主要由 S 原子 p 分波贡献, 其小峰形状改变主要由表面 S 原子的存在而引起的. 图 6 给出了模型 B 中 ZnS 表层及内层原子局域分波态密度. 从图 6 中可以看出, M 峰与 H 峰之间出现的新峰是由 Zn 原子 s 分波和表面 S 原子的 p 分波的贡献. 而伸入禁带

的态也主要是表面 Zn 原子的 s 分波的贡献,但其中也有 S 原子 p 分波与其杂化的贡献. L 峰处左边有一个很小的肩峰的出现则主要是 S 原子的 s 分波峰在表层原子中有所宽化和位移所产生. 该类模型中还有一些小峰的出现主要是由于表层 S 原子 p 分波造成的,是表层 S 原子产生的表面态在态密度图中的反映.

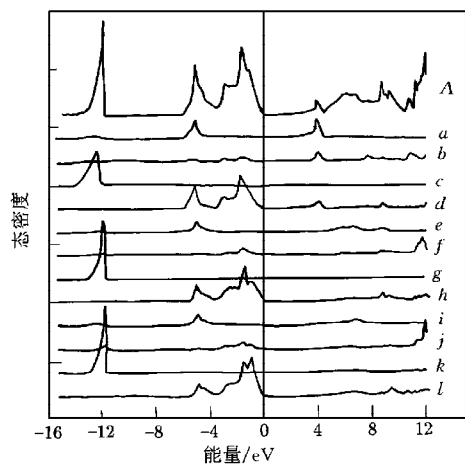


图 5 A 模型 ZnS(111) 表面(单悬键)分层分波态密度图 曲线 A 为总体态密度,曲线 a 为第 1 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 b 为第 1 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 c 为第 2 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 d 为第 2 层 S 原子 p 分波态密度;曲线 e 为第 7 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 f 为第 7 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 g 为第 6 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 h 为第 6 层 S 原子 p 分波态密度;曲线 i 为第 11 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 j 为第 11 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 k 为第 12 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 l 为第 12 层 S 原子 p 分波态密度

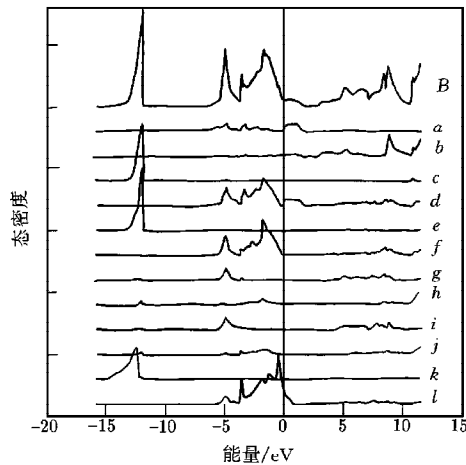


图 6 B 模型 ZnS(111) 表面(三悬键)分层分波态密度图 曲线 B 为总体态密度,曲线 a 为第 1 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 b 为第 1 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 c 为第 2 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 d 为第 2 层 S 原子 p 分波态密度;曲线 e 为第 7 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 f 为第 7 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 g 为第 6 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 h 为第 6 层 S 原子 p 分波态密度;曲线 i 为第 11 层 Zn 原子 s 分波态密度;曲线 j 为第 11 层 Zn 原子 p 分波态密度;曲线 k 为第 12 层 S 原子 s 分波态密度;曲线 l 为第 12 层 S 原子 p 分波态密度

通过比较,可以看出图 4 曲线 a, b 所示费密能级上态密度值不相同,模型 A 的小于模型 B 的. 根据结构稳定性与费密能级上态密度值的关系,费密能级上的高态密度值对应于不稳定结构,因而从图 4 上不难发现表面单悬键模型 A 较三悬键模型 B 所代表的表面结构稳定. 该结果与 Wu 等^[20]的观点一致. CdTe(111) 表面也存在类似结论^[19].

4 理论与实验结果对比及表面态分析

4.1 理论与实验的比较

为了与实验所测量的光电子价带谱对比,我们定义模型 A 的 slab 结构中正表面从第 1 层取到第 6 层原子的态密度总和为模型 A 的 Zn 表面的总态密度,而从第 7 层取到第

12 层(即 slab 背表面)的原子态密度总和为模型 A 的 S 表面的总态密度.对层数的定义,是取每一原子层面为一层,对 B 类表面也可作同样的定义.这样选取主要是因为实验所用同步辐射光源能量为 100 eV,样品中光电子的逃逸深度一般为 5 到 6 个原子层厚度.

图 7 分别给出了上述定义下模型 A, B 的 Zn, S 表面的总态密度,比较图 7 中两种不同的 Zn 表面可以发现,对 B 类 Zn 表面在 M, H 之间新出现一个小峰 $E = -2.82$ eV,并在费密能级处有一个小包,中心位于 $E = 1.27$ eV;而对 A 类表面,则只是在 H 峰左侧出现一个平台其能量区间在 $E = -2.82$ 到 -2.00 eV.两种模型中 S 表面的区别也是比较明显的,对于 B 类表面,在 M, H 峰之间有一个小尖峰 $E = -2.82$ eV,在 H 峰右侧还存在一个小的尖峰 $E = 0.82$ eV,对 A 类 S 表面,它虽然在 H 峰右侧存在一个尖峰,但它与 B 类 S 表面的尖峰所处位置不同,其能量 $E = -1.00$ eV.通过与实验所测得的价带谱曲线对比,并考虑到实验曲线谱峰宽化,可以发现 A 类 S 表面的态密度在外形包络上

最接近实验所测量的价带谱(见图 1 曲线 a, c).进一步考察细致结构可以发现, A 类 S 表面中所对应的峰位和平台位置分别为: M 峰 $E_1 = -5.00$ eV, 平台 $E_2 = -2.82$ 到 -2.00 eV, H 中两个峰 $E_3 = -1.55$ eV, $E_4 = -1.0$ eV.而实验中在 $E_1 = -4.92$ eV, $E_2 = -2.82$ eV, $E_3 = -1.56$ eV, $E_4 = -0.80$ eV(取价带顶处为 0 eV)均有细致结构,符合较好.进一步,从样品表面芯能级光电子谱的分析中(本文中未给出),我们确定样品表面是富 S 原子的.实验所测的样品在经过 300 °C 退火后,为有序的表面,通常这种处理得到的样品表面是一种稳定的状态.另外在本文第三节中已经得到单悬键的 A 模型比三悬键的 B 模型表面稳定.从实验测量的价带谱与表面理论态密度曲线的比较,实验芯能级谱的结果以及样品表面稳定性分析,我们可以得到实验所测量的样品表面接近 A 类 slab 模型的 S 单悬挂键表面.从实验曲线中还可以发现 ZnS(111)表面在价带顶附近不存在表面态,这与理论计算的稳定单悬键 S 表面态密度曲线所给出的结果是一致的,同时也与 Maierhofer 等^[21]关于 ZnS(111)表面在价带顶处不存在表面态的结论符合.

4.2 ZnS(111)表面态分析

闪锌矿结构 ZnS 中每一个 Zn 原子与四个最近邻的 S 原子成键,而每一个 S 原子则与四个最近邻的 Zn 原子成键,其键长和键角均相等,这样可以认为 Zn 的 s 电子与 S 的 s-p 电子全部平均地分成四个部分后两两成键,与硅在金刚石结构中 sp^3 杂化相仿,形成四个等价的键,每个键都有 Zn 的 s 电子和 S 的 s, p 电子成分,但当表面出现后,由于表面原

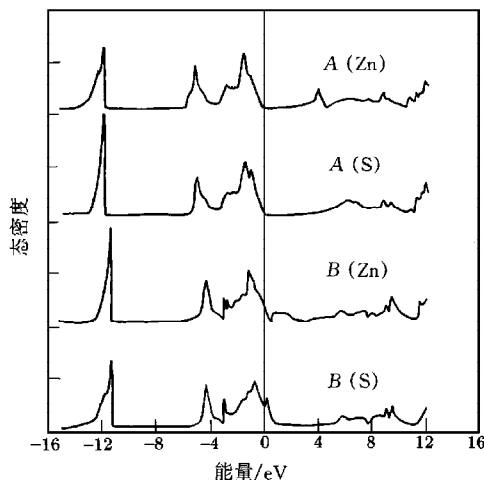


图 7 ZnS(111)模型 A 和 B 的 Zn, S 表面总态密度
A(Zn)单悬键 Zn 表面总态密度; A(S)单悬键 S 表面总态密度; B(Zn)三悬键 Zn 表面总态密度; B(S)三悬键 S 表面总态密度

子的环境与体内发生了改变,其悬挂键电子与成键电子不再全同,因而造成能量状态的分裂,这在上文中已有一定的讨论.从理论计算结果的分层分波态密度中更加容易得到有关表面态的信息.

图 8 曲线 *b—g* 分别给出了模型 A 中第 1 层原子(Zn),第 2 层原子(S),第 5 层原子(Zn),第 6 层原子(S),第 11 层原子(Zn)和第 12 层原子(S)的局域态密度.通过比较图 8

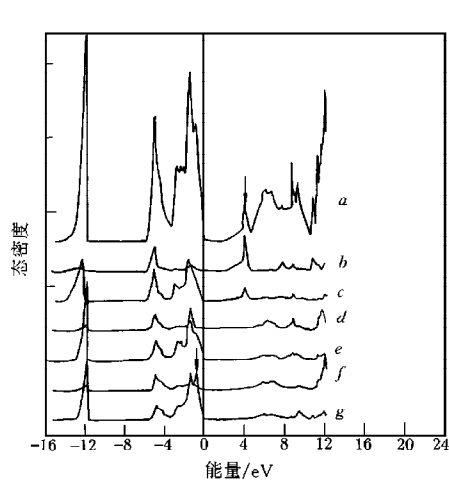


图 8 ZnS(111)模型 A 表面总体及局域态密度
曲线 *a* 为总体态密度;曲线 *b* 为第 1 层 Zn 原子态密度;曲线 *c* 为第 2 层 S 原子态密度;曲线 *d* 为第 5 层 Zn 原子态密度;曲线 *e* 为第 6 层 S 原子态密度;曲线 *f* 为第 11 层 Zn 原子态密度;曲线 *g* 为第 12 层 S 原子态密度

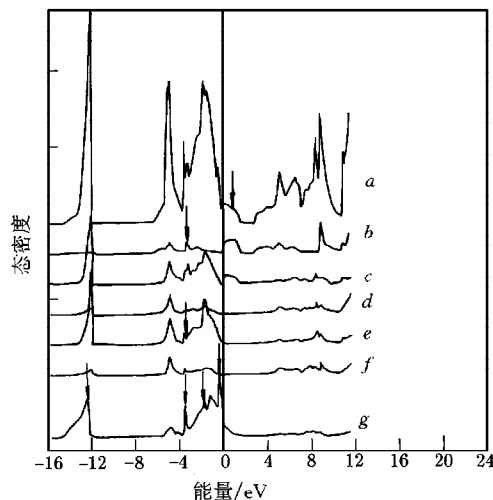


图 9 ZnS(111)模型 B 表面总体及局域态密度
曲线 *a* 为总体态密度;曲线 *b* 为第 1 层 Zn 原子态密度;曲线 *c* 为第 2 层 S 原子态密度;曲线 *d* 为第 5 层 Zn 原子态密度;曲线 *e* 为第 6 层 S 原子态密度;曲线 *f* 为第 11 层 Zn 原子态密度;曲线 *g* 为第 12 层 S 原子态密度

与图 3 可知,第 5 层 Zn 与第 6 层 S 原子的态密度与体态态密度已十分接近,这主要是因为,在计算材料的表面电子结构时,只考虑了近邻原子之间的相互作用,从而 slab 内层原子存在的环境与体态原子已看不出明显区别.表面的存在只能影响 slab 中表面数层原子的局域态密度,越往内部,原子的电子状态受表面的影响越小,态密度中与表面相关的峰也相应减弱,由此可以判断出表层原子中的表面态峰.图 8 中在费密能级 E_F 以上,处于体态禁带和导带部分的 $E=4.00$ eV 处有一明显的表面态峰,在第二层 S 原子的态密度中此位置处也存在有峰,即形成共振态,在第 5,6 两层原子态密度中没有对应的峰,从分波态密度(见图 5)可以判明该表面态峰主要为 Zn 的 s, p 分波杂化峰贡献,由于处于 E_F 以上,它是一个未占据的表面态,在第 12 层 S 原子与第 6 层 S 原子局域态密度比较中,可以发现在 $E=-0.91$ eV 处有一态,也是一个表面态,但它与上面形成的表面态不同,该态仅存在于第 12 层 S 原子态密度中,可以认为是纯的表面态,它较共振态分布的范围要小得多.由 S 的表面态分波态密度可分析出 S 表面态主要是 S 原子的 p 分波贡献,与其 s 分波基本没有关系.

图 9 曲线 *b—g* 分别给出了 B 类表面的相应结果.对比 A, B 两类模型内层 Zn, S 原

子态密度图,可以发现两者在总体形状上区别很小,均相似于体态的态密度图.但图 9 中在第 5,6 层的态密度图 $E = -2.82 \text{ eV}$ 处有一很小的峰,它们是表面态在此能量位置的体现. slab 内层原子的态密度中仍能发现表面态的影响,说明了 B 类模型表面态较 A 类模型更明显.这是与模型 B 上下表面原子均有三个悬挂键而模型 A 表层原子只有一个悬挂键有关,对于 Zn 表面,在 $E = -2.82 \text{ eV}$ 处有一个共振态,它不仅存在于表层的 S, Zn 原子态密度中,在内层的 S, Zn 原子的局域态密度图中也有一定的表现,表明它是一个很强的共振态,在费密能级上 $E = 1.27 \text{ eV}$ 处有一个宽峰,由于它仅存在于 1,2 层原子态密度中,说明它是一个较弱的共振态.值得指出的是,该态由于跨接费密能级,只有部分态被占据,显示出金属性,从分波态密度(见图 6)可以区别这两个表面态主要是 Zn 原子的 s 分波和 S 原子的 p 分波构成.对于 S 表面,从图 9 曲线 g, e 可以发现该类表面的表面态是十分丰富的.如图 9 所示 $E = -2.91 \text{ eV}$, $E = -1.73 \text{ eV}$, $E = -0.64 \text{ eV}$ 处的峰,而且全部都是 S 原子的 p 分波的贡献.不仅如此,仅由 s 分波构成的约在 $E = -11.83 \text{ eV}$ 处的峰也有所宽化,可见 B 类表面是有着复杂的电子结构的.这些表面峰除 $E = -2.91 \text{ eV}$ 处显示出较弱的共振外,其余都是纯表面态峰.

从上面的分析中不难发现,对于模型 A 和模型 B,它们的表面态数量有明显的差别,模型 B 的表面态更多,而且在费密能级处有表面态跨接.这是由于模型 B 表面是三悬挂键,表层原子中未成键电子多,从而形成了较复杂的表面电子态.另外无论对于模型 A 还是模型 B, Zn 原子结尾表面较 S 原子结尾表面其表面态要少,而且前者主要是以共振表面态存在,后者主要是以纯表面态形式存在,这表明 S 原子的表层原子的表面态密度具有更好的局域性,而 Zn 原子为表层原子的表面局域性则较弱.这在电子器件特别是对于超晶格等量子器件应用,在讨论表面和界面电子输运性质时都会产生一定的影响.对于 Zn 表面和 S 表面表面态的不同性质,其原因分析如下:虽然 Zn—S 为共价键,但它们之间存在电荷转移,具有离子键成分,为了简单估算原子间的有效电荷转移,应用了有效电荷概念^[22],对于晶体 ZnS,电荷转移数为 0.154,这样单个 Zn 原子有效电荷数为 1.846,而单个 S 原子有效电荷数为 6.154, Zn 原子所带的价电子比 S 原子的要少很多,因此在 slab 模型计算中,表面及真空的出现单纯由 Zn 表面的少量价电子来平衡是不够的,表面真空层必然会影响内层原子的电荷分布的变化,而 S 原子的价电子较多,平衡能力强,对真空层的屏蔽作用大,表面对内层原子的电荷分布的影响可大大减弱,这就是导致 ZnS 表面态性质不同的原因.

5 结 论

本文通过研究 ZnS(111)两类无再构无弛豫表面,给出了与实验结果相符的价带态密度,理论与实验的对比表明, ZnS(111)表面在经过溅射退火后,为稳定的 S 单悬键表面,证明了对于稳定的 ZnS(111)表面,其价带顶处不存在表面态.进一步的理论分析讨论了两类表面的表面态及其稳定性,模型 A 的 Zn 种表面有一个明显的共振态,是全空的,模型 A 的 S 种表面只有一个明显的表面态,是全占据的,模型 B 的 Zn 种表面有两个明显的表面态,一个占据,一个部分占据,模型 B 的 S 种表面比较复杂,有三个明显的表面态,

两个占据,一个部分占据,讨论还发现无论模型 A, B, Zn 种表面的表面态局域性弱,而 S 种表面的表面态局域性强,文中分析了 Zn 表面和 S 表面的表面态不同性质的产生原因,为今后的实验研究及该材料在超晶格等器件中的实际应用提供了理论基础。_

感谢邓学功博士给予的帮助。

- [1] E. Symposium, Properties of II-VI Semiconductors; Bulk Crystals, Epitaxial Films, Quantum Well Structures and Dilute Magnetic Systems (American Materials Research Society, Nov. 27—Dec. 1, 1989).
- [2] M. A. Haase, J. Qiu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **59**(1991), 1272.
- [3] Z. Yu, J. Ren *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **61**(1992), 1266.
- [4] Tsunemasa Taguchi, Chikara Onodera, Yoichi Yamada and Yasuaki Masumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **32**(1993), L1308.
- [5] T. Taguchi, Y. Endoh, T. Ohno and Y. Nozue, *J. Lumin.*, **54**(1992)342.
- [6] Y. Yamada, Y. Masumoto, J. Mullins and T. Taguchi, *Appl. Phys. Lett.*, **61**(1992), 2190.
- [7] Y. Endoh and T. Taguchi, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **161**(1990), 211.
- [8] Robert W. Jansen and Otto F. Sankey, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 6520.
- [9] Oleg Zakharov, Angel Rubio, X. Blase, Marvin, L. Cohen and Steven G. Louie, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 10780.
- [10] James E. Bernard and Alex Zunger, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 3199.
- [11] C. Calandra, G. Santora, *J. Vac. Sci. Technol.*, **13**(1976), 773.
- [12] Y. R. Wang and C. B. Duke, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 2763.
- [13] Hartmut Hochst and David W. Niles, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 8370.
- [14] 李永平、张海峰、潘必才, *物理学报*, **43**(1994), 622.
- [15] H. L. Skriver, *The LMTO Method* (Springer, Berlin, 1984).
- [16] O. K. Anderson, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 3060.
- [17] C. S. Wang and B. M. Klein, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 3393.
- [18] T. Taguchi and Y. Yamada, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **161**(1990), 199.
- [19] 张海峰、李永平、方容川、杨风源, *物理学报*, **44**(1995), 280.
- [20] Y. S. Wu, C. R. Becker *et al.*, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 8904.
- [21] Ch. Maierhofer, S. Kulkarni, M. Alonso, T. Reich and K. Horn, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B9**(4)(1991), 2238.
- [22] 段文辉、顾秉林、朱嘉麟, *物理学报*, **39**(1990), 437.

A STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF ZnS(111)

BAN DA-YAN ZHANG HAI-FENG LI YONG-PING FANG RONG-CHUAN

(*Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026*)

(Received 22 June 1995; revised manuscript received 6 September 1995)

ABSTRACT

By using the linear muffin-tin orbital (LMTO) method, the surface electronic structure of ZnS(111) slab model is calculated, the total, local and partial densities of states for these models are presented. The structure stability and surface state are discussed. Theoretical density of states is in good agreement with the experimental result obtained from the synchrotron radiation photoemission spectra of the ZnS(111) surface.

PACC: 7320