

用激子动力学方法研究 N 吸附子 扫描隧道显微镜系统图谱解释*

黄新堂 祁守仁

(华中师范大学物理系, 武汉 430070)

(华中理工大学固体电子学系, 武汉 430074)

李永平 张海峰 王昌燧

(中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

(1994年7月6日收到)

应用激子动力学方法描述扫描隧道显微镜 (STM) 隧道中电子运动的动力学行为新方案, 推导得到了 N 吸附子 STM 系统纯相干记忆函数与时间无关时隧道电流与探针空间位置之间的一般关系式, 讨论了公式的应用范围, 并作为应用, 具体计算了 Dimer 模型 STM 系统 $\text{Au}(110)2 \times 1$ 和 3×1 再构表面 STM 图谱, 其结果与实验及其它理论符合得很好。

PACC: 7135; 6116P

1 引 言

关于扫描隧道显微镜 (STM) 图谱解释, 目前被普遍接受的理论为 Tersoff-Hamann 理论^[1]。该理论是基于一级含时微扰的量子理论, 一般要求如下限制条件: 各态之间的相互作用必须足够弱, 以至于可以处理为“微扰”; 温度不能太高, 从而简化量子跃迁过程; 电子在跃迁过程中为非相干的, 以便可以使用 Fermi 黄金规则。为了突破以上条件的限制, 1992年, Kenkre 等^[2]提出了用激子动力学方法描述扫描隧道显微镜隧道中电子运动的动力学行为新方案。该文基本思想是用量子统计力学中的随机刘维方程描述隧道中电子传播过程; 将 STM 系统处理为三组态系统——基底组态、吸附组态和探针组态; 同时与热库相互接触交换能量。在此基础上, 文献[3]得到了单吸附子 STM 系统纯相干记忆函数与时间无关时 STM 图谱解释的解析公式。为了进一步研究双吸附子 STM 系统图谱解释以及吸附态之间的相互作用对 STM 图谱的影响, 文献[4]得到了具体公式, 并应用其解释了 $\text{Au}(110)2 \times 1$ 和 3×1 再构表面的 STM 图谱, 讨论了基底厚度对 STM 图谱的影响。对于一般情形的 N 吸附子 STM 系统, 本文得到了普遍的隧道电流与探针空间位置之间的关系式, 并作为应用进一步计算了 Dimer 模型吸附子系统 $\text{Au}(110)2 \times 1$ 和

* 中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室资助的课题。

3 × 1 再构表面(次表面为 2 × 1 和 1 × 1 再构)的 STM 图谱, 其结果与实验及其它理论符合得很好。

2 一般关系式

有热库相互接触时, 描述隧道中电子动力学行为的随机刘维方程 (SLE) 为^[1]

$$i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = [H, \rho - \rho^i]_{mn} - \alpha(1 - \delta_{mn})(\rho_{mn} - \rho_{mn}^i), \quad (1)$$

其中 α 表示相干衰减率, 这里设它为一常数; ρ_{mn}^i 表示密度矩阵的热相互作用部分贡献; m 和 n 分别取 $S, M1, M2, \dots, MN, T$, 标记基底组态, N 个吸附子态和探针组态。可以证明^[5-7], 在很大的温度范围, (1) 式等效于下面的广义主方程 (GME):

$$\frac{dP_m(t)}{dt} = \int_0^t ds \sum_n [W_{mn}(t-s)P_n(s) - W_{nm}(t-s)P_m(s)],$$

$$m, n = S, M1, M2, \dots, MN, T, \quad (2)$$

其中 $P_m(t)$ 表示 t 时刻电子处于 m 态的概率; $W_{mn}(t)$ 为有热库相互作用时的记忆函数, 此时它与纯相干情形记忆函数有如下关系:

$$W_{mn}(t) = W_{mn}^c(t) \exp(-\alpha t), \quad (3)$$

$W_{mn}^c(t)$ 为纯相干情形记忆函数。在引进由于外加电压存在, 电子分别逃逸基底组态和探针组态的速率 R_S 和 R_T 后, 得到了隧道电流与各传播子之间的关系式^[1]

$$i = \left(\sqrt{\frac{R_S}{R_T}} P_S^i - \sqrt{\frac{R_T}{R_S}} P_T^i \right) \times \left\{ \sqrt{\frac{R_S}{R_T}} \int_0^\infty dt [\Pi_{SS}(t) - \Pi_{ST}(t)] + \sqrt{\frac{R_T}{R_S}} \int_0^\infty dt [\Pi_{TT}(t) - \Pi_{TS}(t)] \right\}^{-1}, \quad (4)$$

其中

$$P_S^i = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \Pi_{Sn}(t) P_n(0), \quad n = S, M1, M2, \dots, MN, T, \quad (5)$$

$$P_T^i = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \Pi_{Tn}(t) P_n(0), \quad n = S, M1, M2, \dots, MN, T, \quad (6)$$

$P_n(0)$ 表示电子初始时刻处于各态的概率; $\Pi_{mn}(t)$ 为各组态间的传播子, 表示电子初始时刻在 n 态时的 m 态概率。这里已将吸附组态分解为 N 个单态来考虑。

为了进一步得到 N 吸附子 STM 系统隧道电流与探针空间位置之间的直接关系式, 由(2)式, 在拉普拉斯相空间得到如下代数方程组:

$$\left[\varepsilon + \sum_{n \neq m} \tilde{W}_{mn}(\varepsilon) \right] \tilde{P}_m(\varepsilon) - \sum_{n \neq m} \tilde{W}_{nm}(\varepsilon) \tilde{P}_n(\varepsilon) = P_m^0,$$

$$m, n = S, M1, M2, \dots, MN, T, \quad (7)$$

其中 $\tilde{W}_{mn}(\varepsilon)$, $\tilde{P}_m(\varepsilon)$ 为相空间中记忆函数和概率, ε 为拉普拉斯变量。根据传播子的定义^[5-7], 设纯相干记忆函数 $W_{mn}^c(t)$ 与时间无关(这一假设在广泛的实际问题中有意义, 详见后面讨论), 于是有

$$\tilde{W}_{mn}(\varepsilon) = W_{mn}^c(t)/(\varepsilon + \alpha). \quad (8)$$

求解(7)式不难得到相空间中各传播子的表达式

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_{SS}(\varepsilon) &= [S^{N+1} + A_{11}S^N + A_{12}S^{N-1} + \cdots + A_{1N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{SM_1}(\varepsilon) &= [A_{21}S^N + A_{22}S^{N-1} + \cdots + A_{2N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{SM_2}(\varepsilon) &= [A_{31}S^N + A_{32}S^{N-1} + \cdots + A_{3N+1}]/\Delta_0, \\ &\dots\dots \\ \tilde{\Pi}_{SMN}(\varepsilon) &= [A_{N+11}S^N + A_{N+12}S^{N-1} + \cdots + A_{N+1N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{ST}(\varepsilon) &= [A_{N+21}S^N + A_{N+22}S^{N-1} + \cdots + A_{N+2N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{TT}(\varepsilon) &= [S^{N+1} + B_{11}S^N + B_{12}S^{N-1} + \cdots + B_{1N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{TM_1}(\varepsilon) &= [B_{21}S^N + B_{22}S^{N-1} + \cdots + B_{2N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{TM_2}(\varepsilon) &= [B_{31}S^N + B_{32}S^{N-1} + \cdots + B_{3N+1}]/\Delta_0, \\ &\dots\dots \\ \tilde{\Pi}_{TMN}(\varepsilon) &= [B_{N+11}S^N + B_{N+12}S^{N-1} + \cdots + B_{N+1N+1}]/\Delta_0, \\ \tilde{\Pi}_{TS}(\varepsilon) &= [B_{N+21}S^N + B_{N+22}S^{N-1} + \cdots + B_{N+2N+1}]/\Delta_0, \end{aligned} \quad (9)$$

其中

$$\Delta_0 = \varepsilon[S^{N+1} + A_{01}S^N + A_{02}S^{N-1} + \cdots + A_{0N+1}], \quad (11)$$

$$S = \varepsilon(\varepsilon + \alpha), \quad (12)$$

$A_{01}, A_{11}, B_{11}, \dots$ 均为 $W_{mn}^c(t)$ ($m, n = S, M_1, M_2, \dots, MN, T$) 的组合, 与时间无关. 对于具体 N 值, 这些系数原则上都可以解析地表示出来, 已用 REDUCE 程序计算了 $N \leq 4$ 的所有系数表达式. 同时不难证明

$$A_{1N+1} = A_{2N+1} = A_{3N+1} = \cdots = A_{N+2N+1}, \quad (13)$$

$$B_{1N+1} = B_{2N+1} = B_{3N+1} = \cdots = B_{N+2N+1}. \quad (14)$$

余下的工作是将各 $\tilde{\Pi}_{mn}(\varepsilon)$ 转换到实 t 空间中去, 并计算(4)式中的积分和极限. 根据海维赛德展开式^[9]首先求

$$P_s^i = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \Pi_{sn}(t) P_n(0), \quad n = S, M_1, M_2, \dots, MN, T, \quad (15)$$

由于

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_{SS}(t) &= \mathcal{L}^{-1}[\tilde{\Pi}_{SS}(\varepsilon)] \\ &= \mathcal{L}^{-1}\{[\varepsilon^{N+1}(\varepsilon + \alpha)^{N+1}A_{11}\varepsilon^N(\varepsilon + \alpha)^N + \cdots + A_{1N+1}]/\Delta_0\}, \end{aligned} \quad (16)$$

\mathcal{L}^{-1} 表示拉普拉斯逆变换. 又由海维赛德展开式^[9]及(15)式可见, 实际问题中, $\Delta_0 = 0$ 的根 ε_i ($i = 1, 2, 3, \dots, 2N + 3$) 不可能有大于零的情形, 同时一般情形下 $\Delta_{0N+1} \neq 0$, 故 $\varepsilon_i = 0$ 的根只可能是单根. 这样看来 $\Pi_{SS}(t)$ 对 P_S^i 有贡献的部分只能是 $\varepsilon_j = 0$ 的一项, 即

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Pi_{SS}(t) P_S(0) = \frac{A_{1N+1}}{A_{0N+1}} P_S(0). \quad (17)$$

同理, 可得其它各 $\lim_{t \rightarrow \infty} \Pi_{sn}(t) P_n(0)$ 的结果, 又由于(13)式, 所以有

$$P_s^i = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \Pi_{sn}(t) P_n(0)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{A_{1N+1}}{A_{0N+1}} [P_S(0) + P_{M_1}(0) + P_{M_2}(0) + \cdots + P_{M_N}(0) + P_T(0)] \\
&= A_{1N+1}/A_{0N+1}.
\end{aligned} \tag{18}$$

同上分析,可得

$$P_T^i = B_{1N+1}/A_{0N+1}. \tag{19}$$

接着计算

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dt [\Pi_{SS}(t) - \Pi_{ST}(t)] &= \int_0^\infty dt \mathcal{L}^{-1} \{ [S^{N+1} + C_{11}S^N + \cdots + C_{1N}S] / \Delta_0 \} \\
&= \int_0^\infty dt \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{f(\varepsilon)}{(\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2) \cdots (\varepsilon - \varepsilon_{2N+2})} \right\},
\end{aligned} \tag{20}$$

其中

$$f(\varepsilon) = \varepsilon^N(\varepsilon + \alpha)^{N+1} + C_{11}\varepsilon^{N-1}(\varepsilon + \alpha)^N + \cdots + C_{1N}(\varepsilon + \alpha), \tag{21}$$

$$C_{1i} = A_{1i} - A_{N+2i}, \quad i = 1, 2, \cdots, N. \tag{22}$$

根据海维赛德展开式,并设 $\Delta_0 = 0$ 时

$$\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2 \neq \varepsilon_3 \neq \cdots \neq \varepsilon_{2N+2}, \tag{23}$$

则有

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dt [\Pi_{SS}(t) - \Pi_{ST}(t)] &= \frac{f(\varepsilon_1)}{-\varepsilon_1(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cdots (\varepsilon_1 - \varepsilon_{2N+2})} \\
&+ \frac{f(\varepsilon_2)}{-\varepsilon_2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) \cdots (\varepsilon_2 - \varepsilon_{2N+2})} \\
&+ \cdots + \frac{f(\varepsilon_{2N+2})}{-\varepsilon_{2N+2}(\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_1)(\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_2) \cdots (\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_{2N+1})}.
\end{aligned} \tag{24}$$

为了得到(24)式的简洁表达结果,考虑如下复函数积分:

$$\oint_D F(x) dx = \oint_D \frac{f(x)}{x(x - \varepsilon_1)(x - \varepsilon_2) \cdots (x - \varepsilon_{2N+2})} dx, \tag{25}$$

积分区域 D 取为含所有分母根值在内的圆域。根据复变函数知识,(25)式的积分在 $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2 \neq \cdots \neq \varepsilon_{2N+2}$ 时为

$$\begin{aligned}
\oint_D F(x) dx &= \frac{f(\varepsilon = 0)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{2N+2}} + \frac{f(\varepsilon_1)}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cdots (\varepsilon_1 - \varepsilon_{2N+2})} \\
&+ \cdots + \frac{f(\varepsilon_{2N+2})}{\varepsilon_{2N+2}(\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_1) \cdots (\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_{2N+1})}.
\end{aligned} \tag{26}$$

同时可以求得 $F(x)$ 在 $x = \infty$ 处的留数为 0, 而 $F(x)$ 在整个复平面上又无其它奇点, 所以有

$$\begin{aligned}
\oint_D F(x) dx &= \frac{f(\varepsilon = 0)}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{2N+2}} + \frac{f(\varepsilon_1)}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cdots (\varepsilon_1 - \varepsilon_{2N+2})} \\
&+ \cdots + \frac{f(\varepsilon_{2N+2})}{\varepsilon_{2N+2}(\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_1) \cdots (\varepsilon_{2N+2} - \varepsilon_{2N+1})} = 0,
\end{aligned} \tag{27}$$

于是有

$$\int_0^{\infty} dt [\Pi_{SS}(t) - \Pi_{ST}(t)] = \frac{f(\epsilon = 0)}{\epsilon_1 \epsilon_2 \cdots \epsilon_{2N+2}}. \quad (28)$$

又根据 m 次方程根的性质^[9]有

$$\int_0^{\infty} dt [\Pi_{SS}(t) - \Pi_{ST}(t)] = \frac{\alpha C_{1N}}{A_{0N+1}} = \frac{\alpha(A_{1N} - A_{N+2N})}{A_{0N+1}}. \quad (29)$$

对于 $\Delta_0 = 0$ 有重根的情形, 用以上方法同样可以证明结论一致.

同上理也有

$$\int_0^{\infty} dt [\Pi_{TT}(t) - \Pi_{TS}(t)] = \frac{\alpha(B_{1N} - B_{N+2N})}{A_{0N+1}}. \quad (30)$$

将(18),(19),(29),(30)式代入(4)式中, 有

$$j = \frac{1}{\alpha} \frac{\sqrt{R_S/R_T} A_{1N+1} - \sqrt{R_T/R_S} B_{1N+1}}{\sqrt{R_S/R_T}(A_{1N} - A_{N+2N}) + \sqrt{R_T/R_S}(B_{1N} - B_{N+2N})}. \quad (31)$$

以上隧道电流与探针空间位置之间的直接关系式是从最原始的密度矩阵运动方程为基础解析求导的结果, 所以它的应用并不限于通常的弱耦合近似, 同时还包含了热库的相互作用; 另外, 对于一般的 STM 系统, α 值均在 10^{10}s^{-1} 以上^[4-7], 所以由(3)式可见, $W_{\mu\nu}^c(t)$ 与时间相关的有效区域仅限于 $t > 0$ 的很小邻域内, 于是一般情形将其合理地定为常数 $W_{\mu\nu}^c(0)$ 几乎不会对结果产生什么影响. 因而本文结果有广泛的适用性.

3 应用举例

作为(31)式的一个具体应用, 计算了 Dimer 吸附子 STM 系统—— $A_n(110)2 \times 1$ 和 3×1 再构表面(次表面为 2×1 和 1×1 再构)的 STM 图谱. 关于这个问题已有很多成功的实验^[10,11], 并且在理论上已用含时一级微扰量子理论进行了研究^[12]. 这里应用由激子动力学方法导出的公式(31)预言 $A_n(110)2 \times 1$ 和 3×1 再构表面 STM 图谱是一种全新的尝试. 从下面可以看出, 这种计算简单, 结果也很好地与实验一致.

对于双吸附子 ($N = 2$) STM 系统, (31)式具体表达为

$$j = \frac{1}{\alpha} \frac{\sqrt{R_S/R_T} A_{13} - \sqrt{R_T/R_S} B_{13}}{\sqrt{R_S/R_T}(A_{12} - A_{42}) + \sqrt{R_T/R_S}(B_{12} - B_{42})}, \quad (32)$$

其中的 A_{13}, B_{13} 等用 REDUCE 程序计算得如下结果:

$$\begin{aligned} A_{12} - A_{42} = & W_{SM1}^c W_{SM2}^c + W_{SM1}^c W_{TM2}^c + W_{SM1}^c W_{M2T}^c + W_{SM1}^c W_{M1M2}^c \\ & W_{SM2}^c W_{TM1}^c + W_{SM2}^c W_{M1T}^c + W_{SM2}^c W_{M2M1}^c + W_{TM1}^c W_{TM2}^c \\ & W_{TM1}^c W_{M2T}^c + W_{TM1}^c W_{M1M2}^c + W_{M1T}^c W_{TM2}^c + W_{M1T}^c W_{M2M1}^c \\ & W_{M1T}^c W_{M1M2}^c + W_{TM2}^c W_{M2M1}^c + W_{M2T}^c W_{M2M1}^c + W_{M2T}^c W_{M1M2}^c, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} B_{12} - B_{42} = & W_{M1S}^c W_{SM2}^c + W_{M1S}^c W_{TM2}^c + W_{M1S}^c W_{M2M1}^c + W_{M1S}^c W_{M1M2}^c \\ & W_{M2S}^c W_{SM1}^c + W_{M2S}^c W_{TM1}^c + W_{M2S}^c W_{M2M1}^c + W_{M2S}^c W_{M1M2}^c \\ & W_{SM1}^c W_{SM2}^c + W_{SM1}^c W_{TM2}^c + W_{SM1}^c W_{M1M2}^c + W_{SM2}^c W_{TM1}^c \\ & W_{SM2}^c W_{M2M1}^c + W_{TM1}^c W_{TM2}^c + W_{TM1}^c W_{M1M2}^c + W_{TM2}^c W_{M2M1}^c, \end{aligned} \quad (34)$$

$$A_{13} = W_{SM1}^c W_{SM2}^c W_{M1T}^c + W_{SM1}^c W_{SM2}^c W_{M2T}^c + W_{SM1}^c W_{SM2}^c W_{ST}^c$$

$$\begin{aligned}
& + W_{S M_1}^c W_{M_1 T}^c W_{T M_2}^c + W_{S M_1}^c W_{M_1 T}^c W_{M_1 M_2}^c + W_{S M_1}^c W_{T M_2}^c W_{S T}^c \\
& + W_{S M_1}^c W_{M_2 T}^c W_{M_1 M_2}^c + W_{S M_1}^c W_{M_1 M_2}^c W_{S T}^c + W_{S M_2}^c W_{T M_1}^c W_{M_2 T}^c \\
& + W_{S M_2}^c W_{T M_1}^c W_{S T}^c + W_{S M_2}^c W_{M_1 T}^c W_{M_2 M_1}^c + W_{S M_2}^c W_{M_2 T}^c W_{M_2 M_1}^c \\
& + W_{S M_2}^c W_{M_2 M_1}^c W_{S T}^c + W_{T M_1}^c W_{T M_2}^c W_{S T}^c + W_{T M_1}^c W_{M_1 M_2}^c W_{S T}^c \\
& + W_{T M_2}^c W_{M_2 M_1}^c W_{S T}^c, \tag{35}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{13} = & W_{M_1 S}^c W_{S M_2}^c W_{T M_1}^c + W_{M_1 S}^c W_{T M_1}^c W_{T M_2}^c + W_{M_1 S}^c W_{T M_1}^c W_{M_1 M_2}^c \\
& + W_{M_1 S}^c W_{T M_2}^c W_{M_2 M_1}^c + W_{M_2 S}^c W_{S M_1}^c W_{T M_2}^c + W_{M_2 S}^c W_{T M_1}^c W_{T M_2}^c \\
& + W_{M_2 S}^c W_{T M_1}^c W_{M_1 M_2}^c + W_{M_2 S}^c W_{T M_2}^c W_{M_2 M_1}^c + W_{S M_1}^c W_{S M_2}^c W_{T S}^c \\
& + W_{S M_1}^c W_{T M_2}^c W_{T S}^c + W_{S M_1}^c W_{M_1 M_2}^c W_{T S}^c + W_{S M_2}^c W_{T M_1}^c W_{T S}^c \\
& + W_{S M_2}^c W_{M_2 M_1}^c W_{T S}^c + W_{T M_1}^c W_{T M_2}^c W_{T S}^c + W_{T M_1}^c W_{M_1 M_2}^c W_{T S}^c \\
& + W_{T M_2}^c W_{M_2 M_1}^c W_{T S}^c. \tag{36}
\end{aligned}$$

另外,要得到隧道电流与探针空间位置之间的数值关系,必须要知道探针、吸附子和基底材料各格点之间的相互作用。关于这个问题已有许多具体研究结果^[12-14]。特别是对于 Au, W 等材料,已给出了具体表达式及参数值。这里的 STM 系统为:探针 W(双原子探针头模型,间距为 W 原子最近邻距离 0.274nm,取向为图面水平方向),表面吸附双原子(Dimer)为 Au((110)2 × 1 和 3 × 1 再构表面),基底为表面层以下 Au 原子。由文献[12-14],取原子对之间相互作用形式为

$$\Phi(r) = D_M \{1 - \exp[-\alpha_M(r - R_M)]\}^2 - D_M, \tag{37}$$

密度函数为

$$\rho(r) = r^0 [e^{-\beta r} + 2^0 e^{-2\beta r}], \tag{38}$$

其中 $D_M, \alpha_M, R_M, \beta$ 均为参数值, r 为原子核间距。表 1 给出具体结果^[13]。

表 1 W, Au 原子对相互作用势,密度函数参数值

	D_M/eV	R_M/nm	α_M/nm^{-1}	β/nm^{-1}
W	15.67067	0.158282	12.5741	20.4887
Au	0.67476	0.256862	18.9644	36.9672

由此可以看出, Au, W 原子对之间相互作用仅依赖于核间距,这是一个参数化的 Morse 势。对于我们的 STM 系统,还必须有 Au 原子与 W 原子对之间相互作用关系式。这里采用电荷密度函数对各单质原子对势加权平均的方法

$$\Phi_{ab} = \frac{\rho_b}{\rho_a + \rho_b} \Phi_{aa} + \frac{\rho_a}{\rho_a + \rho_b} \Phi_{bb}. \tag{39}$$

应用(32)–(39)式及表 1 中的参数,对 Au(110)2 × 1 和 3 × 1 再构表面(次表面为 2 × 1 和 1 × 1 再构)的 STM 图谱进行了具体计算。其中各组态间纯相干记忆函数取如下形式^[5-7]:

$$W_{aa}^c(t) = 2 \sum_{\xi \in m} \sum_{\mu \in n} [Q_{\mu}/g_a] |\langle \xi | \Phi | \mu \rangle|^2, \tag{40}$$

$$W_{aa}^c(t) = 2 \sum_{\xi \in m} \sum_{\mu \in n} [Q_{\xi}/g_m] |\langle \xi | \Phi | \mu \rangle|^2, \tag{41}$$

其中

$$g_m = \sum_{\xi \in m} 1, g_n = \sum_{\mu \in n} 1, Q_\xi = Q_\mu = 1. \quad (42)$$

具体计算结果已分别表示在图 1—3 中。图中曲线表示在保持不同恒电流值时, 探针在 xz 平面内移动的轨迹。

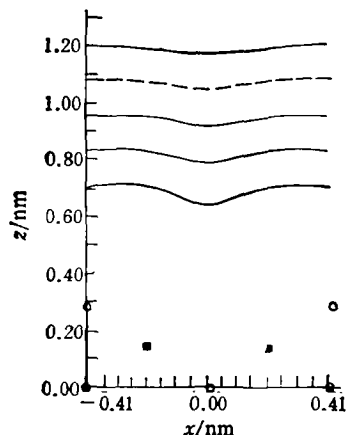


图 1 Au(110) 2×1 再构表面 STM 图谱 虚线对应电流为 1.0 nA , 相邻曲线间对应电流值相差 2 个数量级

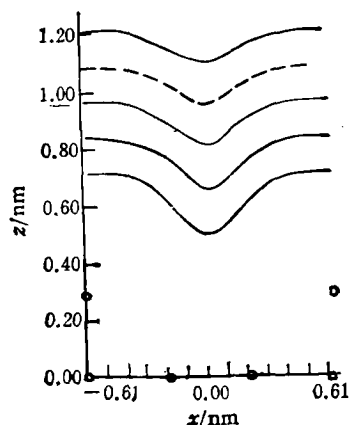


图 2 Au(110) 3×1 再构表面(次表面 2×1 再构)的 STM 图谱 其它结果同图 1

图 1 为 Au(110) 2×1 再构表面 STM 图谱。相邻曲线间电流值相差 2 个数量级。其中虚线对应电流值为 1.0 nA , $\max(\Delta z)$ 为 0.036 nm , 结果在实验允许误差范围之内(实验值为 0.045 nm , 实验或理论误差 $\sim 20\%$)^[1]。图 2 为 Au(110) 3×1 再构表面(次表面 2×1 再构)的 STM 图谱。相邻曲线间电流值相差 2 个数量级。其中虚线对应电流值为 1.0 nA , $\max(\Delta z)$ 为 0.134 nm , 结果与实验很好地一致(实验值为 0.14 nm)^[1]。图 3 为 Au(110) 3×1 再构表面(次表面为 1×1 再构)的 STM 图谱。相邻曲线间电流值相差 2 个数量级。其中虚线对应电流值为 1.0 nA 。这里图 2 与图 3 的差别也较明显, 与其它理论^[1]符合得很好。具体请比较文献[1]中图 3。

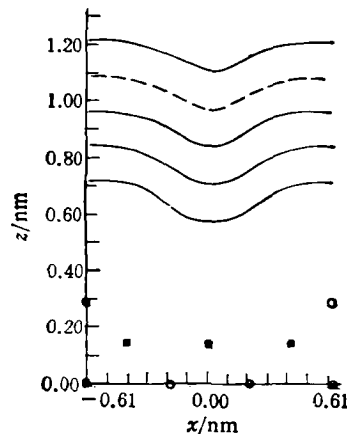


图 3 Au(110) 3×1 再构表面(次表面 1×1 再构)的 STM 图谱 其它结果同图 1

在计算中, 我们取 α 为典型的金属值 $4 \times 10^{-4} \text{ eV}$, R_s/R_T 取为 $\exp(-eV_{tip}/kT)$, T 取室温, V_{tip} 为 0.01 V 。

在以上各图中, \circ 表示在该图平面内原子所在位置, \blacksquare 表示不在该图平面内原子所在位置。同时显见, 吸附表面与探针头表面之间的“真空”距离为 0.4 nm 左右, 与实验结果符合得很好^[10, 11]。

关于探针各种不同具体结构对 STM 图像的影响以及(31)式的其它许多具体应用将另文讨论。

- [1] J. Tersoff and D. R. Hamann, *Phys. Rev.*, **B31** (1985), 805.
[2] V. M. Kenkre, F. Biscarini and C. Busiamante, *Ultramicroscopy*, **42-44**(1992), 122.
[3] 黄新堂、张海峰、李永平, 中国科学技术大学学报, 已接受.
[4] Yongping Li, Xintang Huang, Haifeng Zhang, *Proceedings of STM'93 International Conference Beijing; J. Vac. Sci. Technol.*, in press.
[5] V. M. Kenkre, in: *Exciton Dynamics in Molecular Crystals and Aggregates* (Springer, Berlin, 1982).
[6] V. M. Kenkre, in: *Energy Transfer Processes in Condensed Matter*, ed. B. Di Bartolo (Plenum, New York, 1984).
[7] V. M. Kenkre, *Phys. Lett.*, **A65** (1978), 391.
[8] 沈永欢等, 实用数学手册(北京: 科学出版社, 1992).
[9] 余元庆, 方程论初步(上海: 上海教育出版社, 1964).
[10] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, **50** (1983), 120.
[11] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, *Bull. Am. Phys. Soc.*, **28** (1983), 461.
[12] R. A. Johnson, *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 12554.
[13] S. P. Chen, *Surf. Sci. Lett.*, **274** (1992), L619.
[14] S. P. Chen, *Surf. Sci. Lett.*, **264** (1992), L162.

STUDIES ON THE STM SPECTRUM INTERPRETATION OF N ADSORBATE'S SYSTEM WITH THE METHOD OF EXCITON DYNAMICS

HUANG XIN-TANG QI SHOU-REN

(Department of Physics, Huazhong Normal University, Wuhan 430070)

(Department of Solid State Electronics, Huazhong University of Science and Technology,
Wuhan 430074)

LI YONG-PING ZHANG HAI-FENG WANG CHANG-SUI

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

(Received 6 July 1994)

ABSTRACT

Applying a new programme of treating STM spectrum with the method of exciton dynamics, we obtained the formula relating the tunnelling current with the position of the tip about the N adsorbate's STM system under the condition that the purely coherent memory functions being independent of time, and discussed the range of application. As an example of application, we simulated the dimer adsorbate's STM spectra of Au(110) 2×1 , and 3×1 reconstructed surfaces. The results are in good agreement with the experiments and other theories.

PACC: 7135; 6116P