

محاسبه سطح مشترک (۱۱۱) Pb/Si با استفاده از نظریه تابعی چگالی

مرتضی رفیعی^۱ و سعید جلالی اسدآبادی^۲

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اصفهان، خیابان هزار جریب، اصفهان
۲. مرکز تحقیقات علوم و تکنولوژی نانو، دانشگاه اصفهان، خیابان هزار جریب، اصفهان

(دریافت مقاله: ۸۶/۵/۱۳ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۶/۸/۱۹)

چکیده

تابع کار و انرژی سطح به ازای واحد مساحت در چارچوب نظریه تابعی چگالی به روش امواج تخت بهبود یافته خطی به علاوه اربیتالهای موضعی با پتانسیل کامل برای یک بره متقارن از سیلیکون شامل دو سطح (بالا و پایین) محاسبه شده‌اند. الگوی این سطوح به طور نظری با استفاده از روش ابریخته با روی هم قراردادن تعدادی از لایه‌های سیلیکون در امتداد محور بلور شناسی (۱۱۱) به دست آمده است. به منظور متقارن ساختن این بره دو مقدار یکسان از خلاء در بالا و پایین سطوح (۱۱۱) اضافه شده‌اند. سپس به منظور شبیه سازی سطح مشترک سرب و سیلیکون اتمهای سرب بر روی سطوح آماده شده سیلیکون لایه نشانی شده‌اند. محاسبات در غیاب و حضور برهم‌کنش اسپین - مدار برای سه فاز T₁ (top site)، T₄ (fcc) و H₃ (hcp) انجام شده‌اند. انرژیهای کل محاسبه شده در توافق با اندازه‌گیریهای تجربی نشان می‌دهند که فاز T₁، که در آن اتم سرب در امتداد اتم اولین لایه سیلیکون واقع شده است، پایدارترین فاز می‌باشد. سپس تابع کار، انرژی تشکیل برای سطح مشترک (۱۱۱) Pb/Si در پایدارترین حالت به دست آمده، محاسبه شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که پیوند سیگما بین Si و Pb در سطح مشترک برقرار است.

واژه‌های کلیدی: LAPW+LO، تابع کار و انرژی سطح

۱. مقدمه

هرگاه اندازه‌های فیزیکی یک ساختار به حدود مقیاسهای اتمی نزدیک شود، تأثیرات غیر کلاسیکی اهمیت بیشتری پیدا کرده و مشخصات این ساختارها از مشخصات انبوه آنها انحراف بیشتری می‌یابند. یک درک جامع از تأثیرات غیر کلاسیکی در مقیاسهای اتمی از فلزات، اهمیت اساسی در توسعه موفقیت آمیز و ایجاد دستگاههایی در ابعاد نانو دارد. کوانتش مجاز حالت‌های الکترونی در نانو ساختارهای فلزی منجر به برهم‌کنش بین امواج ایستاده الکترونی با طبیعت گسسته شبکه اتمی می‌شود. این تأثیرات که ناشی از محدود شدن کوانتمی می‌باشند، می‌توانند منجر به درجات بالایی از وابستگی اندازه، در گروه بسیاری از مشخصات مختلف یک دستگاه شامل

ساختار شبکه، مشخصات انتقالی، تعادل گرمایی، تابع کار، دمای انتقال ابررسانایی، برهم‌کنش الکترون-فونون، رفتار رشد، انرژی سطح و غیره شوند [۱]. نشان داده شده است که تأثیرات الکترونیکی کوانتمی نقش مهمی در تعیین رفتار و ریخت شناسی لایه‌های نازک دارند. رشد روز افزون کاربرد لایه‌های نازک در قطعات الکترونیکی و استفاده در دستگاههایی از قبیل حسگرهای مغناطیسی، شیرهای اسپینی و غیره موجب گردیده است که خواص سطحی و پدیده‌های مرتبط با آن موضوع مطالعات ابتدا به ساکن زیادی شوند [۲ و ۳].

صفحات بلورشناسی (۱۱۱) و (۱۰۰) سیلیکون، به علت داشتن انرژی سطح کم از جمله سطوح مورد علاقه برای بستر رشد لایه نازک بوده‌اند. نشان دادن لایه‌های سرب بر روی

برابر ۷/۵ انتخاب شده است که حاصلضرب شعاع کره موفین تین در بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی می‌باشد. بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی $G_{\max} = 14$ انتخاب شده است. یک مش متشکل از تعداد ۵۲ نقطه k خاص برای محاسبه انتگرالهای حالت‌های ظرفیت در لبه ناحیه کاهش ناپذیر بریلوین که متناظر با شبکه $22 \times 22 \times 1$ بر طبق روش مونخارست-پک است در نظر گرفته شده است. برای محاسبات سطح مشترک و خواص انبوه سرب و سیلیکون از تقریب‌های $GGA(Perdew96)$ [۱۰]، $GGA(WC2006)$ [۱۱] و LDA [۱۲] استفاده کرده‌ایم. تناوب بلور بر مناسب بودن امواج تخت برای بسط توابع پایه در گسترش توابع موج الکترونی، تأکید دارد. به هر حال هنگامی که تقارن سه بعدی بلور به وسیله سطح شکسته می‌شود، قضیه بلوخ را نمی‌توان به صورت دقیق به کار برد و چون برای توصیف دقیق ناپیوستگی در سطح به تعداد نامتناهی از امواج تخت نیاز داریم، لذا دیگر امواج تخت برای بسط توابع پایه مناسب نیستند. برای رفع مشکل از دست دادن تقارن در دستگاه از یک یاخته متناوب بزرگتر به نام ابر یاخته استفاده می‌کنیم که باعث ایجاد تناوب مصنوعی در دستگاه می‌شود. با توجه به این که یاخته (1×1) از سطح مورد نظر در دمای اتاق به صورت تجربی مشاهده شده است، از این یاخته واحد برای محاسبات استفاده شده است. خلاء مورد استفاده برای این محاسبات معادل 20 a.u. اختیار شده است که این مقدار با محاسبات دیگران سازگار است [۱۳].

۳. نتایج

۳.۱. خواص ساختاری

از تغییرات انرژی برحسب حجم و مقایسه آنها با معادله حالت مورناگون ثابت شبکه تعادلی محاسباتی، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار، برای انبوه سیلیکون (جدول ۱) و سرب (جدول ۲) با استفاده از تقریب‌های $GGA(Perdew96)$ و $GGA(WC2006)$ به دست آمده‌اند. ثابت‌های شبکه تعادلی به دست آمده از تقریب‌های GGA و LDA به ترتیب

سیلیکون یکی از نمونه‌های اولیه برای مطالعه سطوح فلز-نیمه رسانا بوده است که به علت عدم جذب سرب درون زیر لایه، امکان تشکیل سطح مشترک یکنواخت وجود دارد [۴]. در پوشش کامل سطح (۱ML) برای نشان دادن لایه‌های سرب بر روی سیلیکون در راستای بلور شناسی [۱۱۱] رقابت بین برهم‌کنش $Pb-Si$ و $Pb-Pb$ منجر به تشکیل فازهای بی تناسبی در دمای اتاق می‌شود [۵]. مشاهدات تجربی نشان داده است که با سرد شدن ساختار شش وجهی سطح در حدود دمای اتاق، فاز $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ تشکیل می‌شود که با سرد شدن بیشتر فاز (1×1) نیز در دمای اتاق مشاهده می‌گردد [۶ و ۷].

مشکل اساسی در مطالعه سطح مشترک یک فلز-نیمه رسانا، مشخص نبودن ساختار فصل مشترک آن می‌باشد. روشهای تجربی زیادی برای مشخص شدن هندسه سطح مشترک در لایه‌های نازک به کار می‌روند، اما به علت محدودیتهای موجود در اندازه‌گیریهای تجربی مطالعات نظری به عنوان مکمل اندازه‌گیریهای تجربی ضروری می‌باشند.

۲. جزئیات محاسباتی

در این مقاله از کد محاسباتی WIEN2K برای انجام محاسبات استفاده شده است [۸]. این کد بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است [۹]. برای حل معادلات حاکم بر مسئله از روش امواج تخت بهبود یافته خطی به علاوه اربیتالهای موضعی $(LAPW+LO)$ استفاده کرده‌ایم. این برنامه با انتخاب کره‌های مناسب موفین-تین حول هر یک از اتمها، فضای درون هر یاخته را به دو ناحیه تقسیم می‌کند. تابعی چگالی، پتانسیل و توابع موج الکترونیهای ظرفیت در درون کره‌ها بر حسب هماهنگیهای شبکه و در خارج از آنها بر حسب امواج تختی که بردار موج آنها از تقارنهای گروه فضایی تبعیت می‌کنند، بسط داده می‌شوند. در این محاسبات شعاع کره موفین-تین برای سیلیکون $R_{MT} = 2/23 \text{ a.u.}$ و برای سرب $R_{MT} = 2/5 \text{ a.u.}$ در نظر گرفته شده است. بیشینه عدد کوانتومی مداری برای توابع موج داخل کرات اتمی برابر $l = 10$ انتخاب شده است. در محاسبات نهایی پارامتر $RK_{\max}$

جدول ۱. خواص ساختاری انبوه سیلیکون.

B'	B (Gpa)	a (bohr)	روش محاسباتی و تقریب به کار رفته
۴/۱۶	۸۸	۱۰/۳۴	FP-LAPW+lo, GGA(perdew۹۶)
۴/۲۳	۹۳	۱۰/۲۸	FP-LAPW+lo, GGA(WC۲۰۰۶)
۴/۳۷	۹۶	۱۰/۲۲	FP-LAPW+lo, LDA
۳/۸۲	۸۷	۱۰/۲۵	PPW, LDA [۱۵]
—	۸۷	۱۰/۳۲	PPW, GGA [۱۶]
۴/۰۲	۹۷	۱۰/۲۶	تجربی [۱۷]

جدول ۲. خواص ساختاری انبوه سرب.

B'	B (Gpa)	a (bohr)	روش محاسباتی و تقریب به کار رفته
۵/۰	۴۲/۲	۹/۴۹	FP-LAPW+lo, GGA(Perdew۹۶)
۲/۹	۴۷/۳	۹/۳۱	FP-LAPW+lo, GGA(WC۲۰۰۶)
۳/۷	۵۳/۱	۹/۲۱	FP-LAPW+lo, LDA
۵/۲	۵۲/۶	۹/۱۶	PPW, LDA-PZ [۱۴]
۴/۷	۳۹/۳	۹/۵۶	PPW, GGA-PBE [۱۴]
۴/۹	۴۳/۲	۹/۳۶	تجربی [۱۸]

دو بعدی سطح مورد نظر ساخته می‌شود. در بلورهای با شبکه FCC این واحد سطح در راستای (۱۱۱) بلورشناسی یک شش وجهی می‌باشد. تکرار این آرایه در صفحه موجب پیدایش سطح و در جهت عمود بر سطح منجر به ایجاد لایه‌های مختلف اتمی می‌شود. در مورد سیلیکون به علت دو پایه‌ای بودن انبوه آن تکرار دو لایه‌ها در جهت عمود بر سطح لایه‌های مختلف را تشکیل می‌دهند.

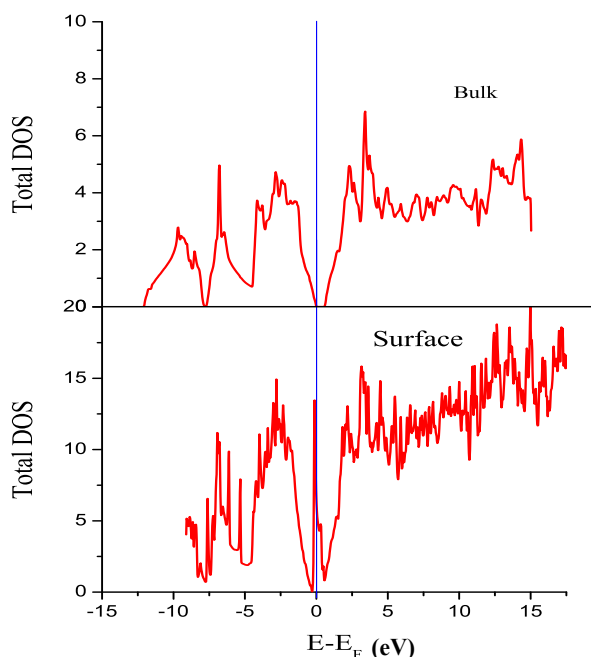
با استفاده از ثابت شبکه به دست آمده از تقریب GGA لایه‌های سیلیکون را شبیه سازی نموده‌ایم. تعداد لایه‌های بهینه مورد نیاز برای زیر لایه، از مقایسه تابع کار و انرژی سطح به ازای واحد مساحت با محاسبه تعداد ۴، ۶، ۸ و ۱۰ دولایه‌ای متقارن سیلیکون به دست آمده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند، با توجه به همگرایی تابع کار و انرژی سطح از تعداد ۸ دولایه‌ای به بعد، این تعداد لایه برای شبیه سازی زیر لایه مناسب می‌باشد (جدول ۳). از آنجا که محاسبات ابتدا به ساکن در دمای صفر درجه مطلق انجام می‌پذیرد، تابع کار ϕ از رابطه

بزرگتر و کوچکتر از مقدار تجربی می‌باشند. نتایج نشان می‌دهند که ثابتهای شبکه تعادلی به دست آمده از تقریب GGA(WC۲۰۰۶) در توافق خوبی با مقادیر تجربی می‌باشند. برای حداقل کردن تنش سطحی در زیر لایه از ثابتهای تعادلی به دست آمده برای سیلیکون، در شبیه سازی سطح استفاده می‌کنیم.

۲.۳. خواص زیر لایه

۱.۲.۳. شبیه سازی سطح Si(۱۱۱)

سیلیکون ماده‌ای نیم‌رساناست که سطوح آن در سالهای اخیر مورد بررسی بسیاری از فیزیکدانان قرار گرفته شده است. سطح (۱۱۱) از این عنصر به عنوان زیر لایه و بستری برای رشد لایه سرب انتخاب شده است. ساده‌ترین ساختار سطحی از برش یک بلور در امتداد سطوح ایده‌آلش که با اندیسهای میلر (hkl) مشخص می‌شوند، به دست می‌آید. هندسه سطح به وسیله سلول واحد سطح کوچکترین بخش سطح که با تکرار آن آرایه



شکل ۱. منحنی چگالی حالت کل در انبوه و سطح (۱۱۱) سیلیکون.

اختلاف چگالی حالت‌های اتم انبوه با اتم سطحی در سه ناحیه در نزدیکی تراز فرمی، حدود (۰ و -۲/۵ eV) و حدود -۷/۵ eV می‌باشد. مقایسه چگالی حالت‌های اربیتال‌های S و P نشان می‌دهد که این اختلافها در نواحی نزدیک به تراز فرمی و حدود (۰ و -۲/۵ eV) ناشی از اربیتال‌های P و در حدود انرژی -۷/۵ eV ناشی از اربیتال‌های S اتم سطحی سیلیکون می‌باشند (شکل ۲). وجود یک قله تیز در حوالی تراز فرمی برای اربیتال‌های P و سهم کم اربیتال‌های S در این ناحیه از انرژی بیانگر این می‌باشد که اربیتال‌های P در پیوندهای جدید شرکت خواهند کرد. در شکل ۳ چگالی حالت‌های مربوط به مولفه‌های $m=0$ و $m=\pm 1$ که به ترتیب معادل $P_x + P_y$ و P_z می‌باشند رسم شده است. مقایسه این دو منحنی نشان می‌دهد که مولفه $m=\pm 1$ یا z از اربیتال P در سطح فرمی دارای یک قله است و لذا چگالی حالت‌های این مولفه از اربیتال در سطح فرمی بیشتر از مولفه $m=0$ است و نقش رسانش را این الکترون‌ها بر عهده دارند. در ضمن این منحنی نشان می‌دهد که مولفه $m=\pm 1$ یا z از اربیتال P در پیوندها شرکت خواهد کرد.

جدول ۳. محاسبه تابع کار و انرژی سطح به ازای واحد مساحت برای Si(۱۱۱).

تعداد دولاپه‌ها	تابع کار (eV)	انرژی سطح به ازای واحد مساحت یاخته 1×1 (eV)
۴	۴/۸۴۸۴	۱/۳۰۳۷
۶	۴/۷۱۷۹	۱/۳۲۸۱
۸	۴/۷۲۹۵	۱/۳۲۷۴
۱۰	۴/۷۲۹۹	۱/۳۲۷۰

زیر به دست می‌آید که در آن، پتانسیل الکترواستاتیکی در وسط خلاء و E_F انرژی فرمی هستند.

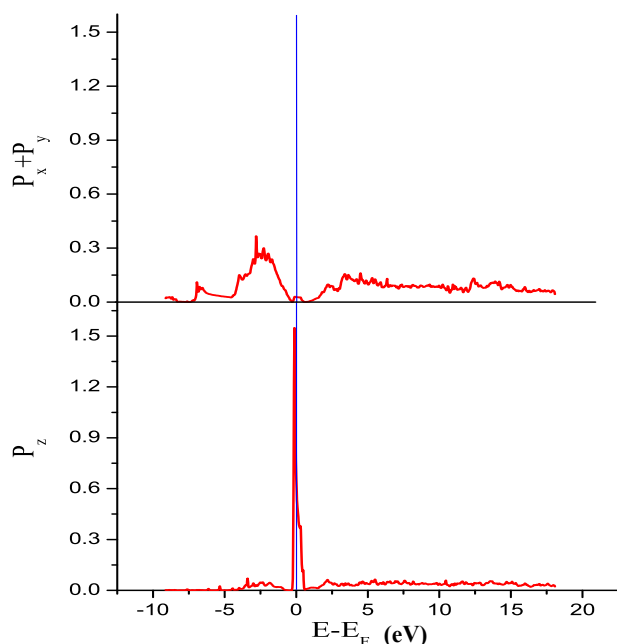
$$\phi = V_C - E_F \quad (1)$$

انرژی سطح به ازای واحد مساحت E^s که عبارت است از انرژی لازم برای شکافتن یک جامد بی نهایت به دو جامد نیمه بی نهایت و تشکیل سطح در راستای شکافتگی، از رابطه زیر به دست می‌آید که در آن E^{slab} انرژی کل ابر یاخته، N_{Si} و E_{Si}^{bulk} به ترتیب، تعداد اتم‌های سیلیکون و انرژی انبوه سیلیکون می‌باشند. به علت تشکیل دو سطح یکسان در دو طرف ابر یاخته ضریب $\frac{1}{2}$ را وارد کرده‌ایم [۱۸].

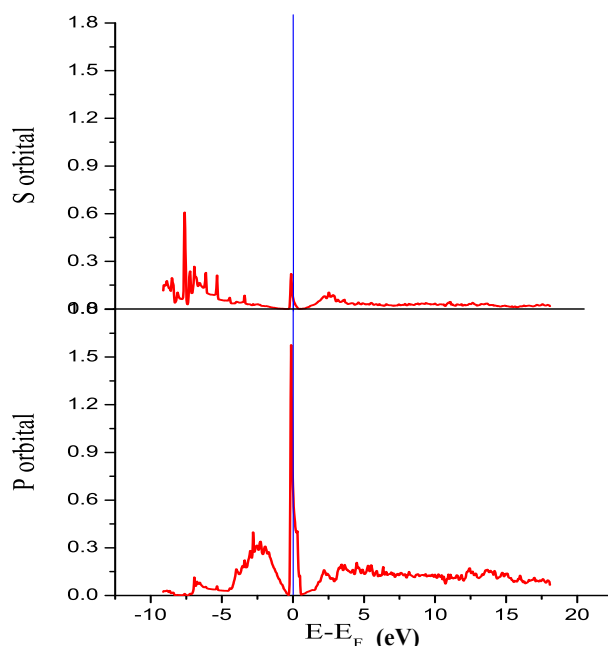
$$E^s = \frac{1}{2} (E^{slab} - N_{Si} E_{Si}^{bulk}) \quad (2)$$

۳.۲.۲. بررسی چگالی حالات سطح Si(۱۱۱)

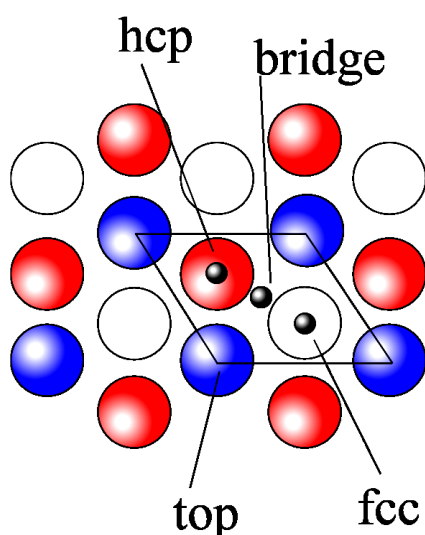
چگالی حالت انبوه سیلیکون با چگالی حالت ۸ دولاپه‌ای از سطح (۱۱۱) سیلیکون در شکل ۱ با یکدیگر مقایسه شده‌اند. در چگالی حالت انبوه، خاصیت نیمه هادی بودن سیلیکون با صفر شدن چگالی حالتها در نزدیکی تراز فرمی و ایجاد یگ گاف کوچک مشخص می‌باشد. چگالی حالت‌های اتم سطحی سیلیکون نشان می‌دهند که سطح (۱۱۱) سیلیکون به علت قطع شدن تراز فرمی توسط چگالی حالتها، خاصیت فلزی دارد. شکسته شدن پیوندهای اتمی در اتم‌های سطحی و در نتیجه پیدایش اتم‌هایی با پیوندهای آزاد باعث به وجود آمدن این خاصیت در سطح سیلیکون شده است.



شکل ۳. منحنی چگالی حالت مولفه‌های P_z و $P_x + P_y$ اتم سیلیکون.



شکل ۴. منحنی چگالی حالت اربیتالهای S و P برای اتم سطحی سیلیکون.



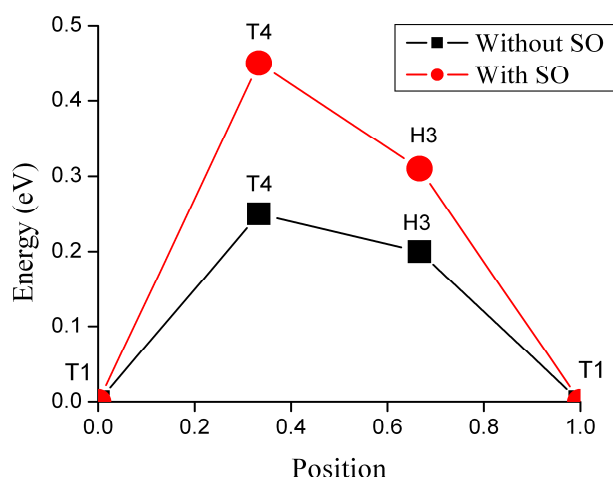
شکل ۵. مکانهای مختلف قرار گیری اتم سرب، اتم آبی لایه اول، سفید لایه دوم و قرمز لایه چهارم سیلیکون می‌باشد.

کمتر از ۱ mRy/bohr وارد می‌شود. در محاسبات از یک ابر یاخته متقارن که اتم سرب در هر دوطرف بالا و پایین آن نشانه شده است استفاده کرده‌ایم (شکل ۵). نتایج ناشی از محاسبات با در نظر گرفتن و بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار نشان می‌دهند، که فاز T1 نسبت به فازهای دیگر از پایداری نسبی بیشتری برخوردار است (شکل ۶). برای

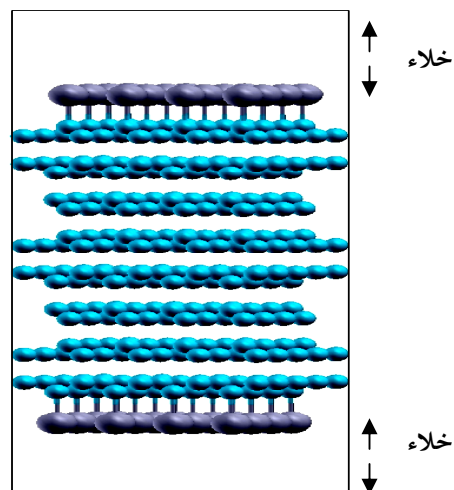
۳.۳. لایه نازک سرب بر روی سیلیکون

۳.۳.۱. بررسی فازهای مختلف تشکیل سطح مشترک

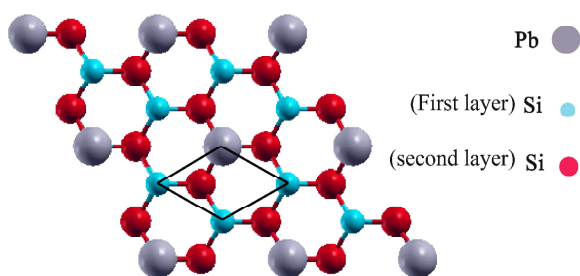
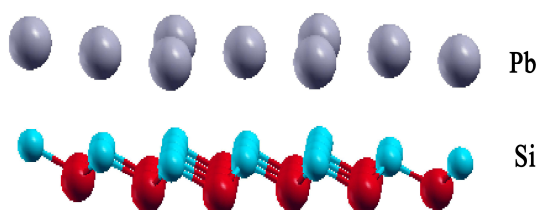
مفید بودن خصوصیات لایه نازک و جالب توجه بودن مطالعه رفتار جامدهای دو بعدی باعث شده است که این گونه مطالعات مورد توجه ویژه‌ای قرار گیرند به گونه‌ای که امروزه بسیاری از قطعات مدرن و پیچیده نوری-الکتریکی و الکترونیکی به صورت لایه نازک ساخته می‌شوند. مشکل اصلی برای رشد لایه‌های نازک بر روی یک زیر لایه، جایگاه پایدار اتمهای لایه اول می‌باشد. جایگاههای پایدار مختلفی در صفحه x-y برای قرار گرفتن اتم سرب بر روی سطح سیلیکون به فاصله d از لایه اول وجود دارد. از آن جمله می‌توان به فاز T1 (top) که در آن اتم سرب در امتداد اتم اولین لایه سیلیکون قرار دارد، فاز T4 (fcc) که در آن اتم سرب در امتداد اتم دومین لایه سیلیکون قرار دارد و فاز H3 (hcp) که در آن اتم سرب در امتداد اتم چهارمین لایه سیلیکون قرار دارد اشاره کرد (شکل ۴). فاصله d به گونه‌ای باید تنظیم گردد تا نیروی وارد بر اتمها تقریباً صفر شود. در این پژوهش هر سه فاز فوق شبیه سازی گردیده و از طریق واهلش اتمها این اطمینان حاصل شده است که بر آنها نیرویی



شکل ۶. منحنی انرژی جایگاههای مختلف نسبت به جایگاه دارای کمترین انرژی (T1).



شکل ۵. ابر یاخته متقارن از ۸ دولایه‌ای Si(۱۱۱) و اتم Pb در بالا و پایین آن.



شکل ۷. نمای عمودی و جانبی از فاز T1. یاخته (۱×۱) در شکل مشخص شده است. در این یاخته اتمهای سرب در گوشه‌های متوازی الاضلاع نشان داده شده قرار می‌گیرند و تمامی اتمهای سیلیکون لایه اول را می‌پوشانند.

۳.۳. تابع کار و انرژی تشکیل

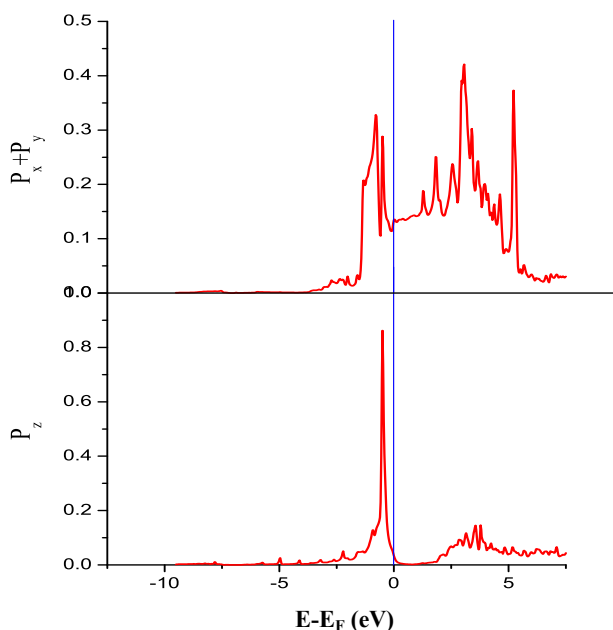
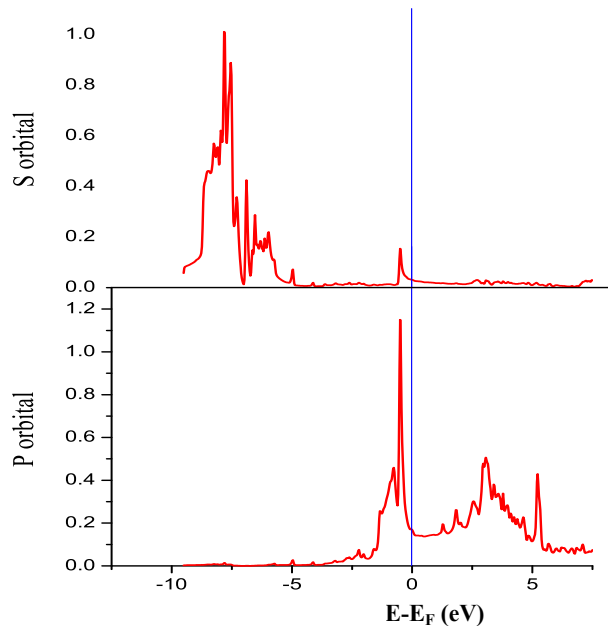
در این تحقیق کمیتی‌هایی از قبیل تابع کار و انرژی تشکیل سطح که از جمله کمیت‌های فیزیکی مهم در سطوح می‌باشند را برای سطح مشترک Pb/Si(۱۱۱) محاسبه نموده‌ایم. این کمیتها در تعیین رفتار سطوح فلزی برای کاربردهای مختلف نقش مهمی را ایفا می‌نمایند [۱۹]. با استفاده از روش شبه پتانسیل انرژی سطح برای لایه‌های نازک Pb(۱۱۱) محاسبه شده است [۲۰]. محاسبات بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار انجام شده است (جدول ۵). تابع کار ϕ ، کمینه انرژی لازم برای خارج ساختن یک الکترون از بلور به خارج از سطح و به درون ناحیه خلاء می‌باشد که از رابطه (۱) به دست می‌آید. انرژی تشکیل سطح به ازای واحد

درک بصری بهتر از فاز T1 در شکل ۷ نمای عمودی و جانبی سطح Pb/Si(۱۱۱) به همراه یاخته (۱×۱) نشان داده شده است.

با استفاده از هر سه تقریب ذکر شده در فوق، واهلش فاز T1 را انجام داده‌ایم. نتایج مربوط به طول پیوند Si-Pb به دست آمده از هر سه محاسبه با طول پیوند گزارش شده توسط دیگران به روش محاسباتی شبه پتانسیل و اندازه‌گیری تجربی، در جدول ۴ بیان شده‌اند. با توجه به توافق بیشتر طول پیوند به دست آمده از تقریب LDA با تجربه، محاسبات نهایی و نتایج آن با استفاده از این تقریب انجام شده‌اند. در طول پیوند محاسبه شده از تقریب LDA با مقدار تجربی، اختلافی معادل ۱/۱۳٪ وجود دارد.

جدول ۵. محاسبه تابع کار و انرژی تشکیل سطح مشترک به ازای واحد مساحت

نوع محاسبه	تابع کار (eV)	انرژی تشکیل (eV به ازای سطح یاخته (۱×۱))
بدون برهم‌کنش اسپین - مدار	۴/۶۳	۰/۵۳
با برهم‌کنش اسپین - مدار	۴/۵۴	۰/۵۱
بدون برهم‌کنش اسپین - مدار به روش شبه پتانسیل [۵]	-	۰/۴۷

شکل ۹. منحنی چگالی حالت مولفه‌های $P_x + P_y$ و P_z اتم سرب.

شکل ۸. منحنی چگالی حالت اربیتالهای S و P برای اتم سرب.

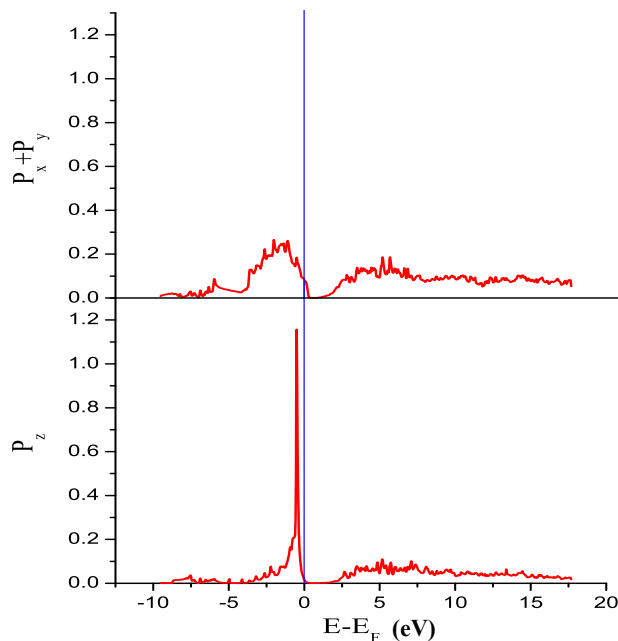
در انرژیهای منفی بیشتری قرار دارد و در نتیجه جایگزیده‌ترند. وجود قله تیز در نزدیکی انرژی فرمی برای اربیتال P این اتم، نقش پیوندی و رسانش این اربیتال را بیان می‌کند. مقایسه چگالی حالت مولفه‌های $m=0$ و $m=\pm 1$ که به ترتیب معادل P_z و $P_x + P_y$ می‌باشند، در شکل ۹ نشان می‌دهد با توجه به وجود قله تیز در اربیتال P_z و وجود گاف نواری در این اربیتال این مولفه از اربیتال P در پیوند با اتمهای Si شرکت کرده است. قطع شدن سطح فرمی در مولفه x و y اربیتال P گواه عدم شرکت این اربیتالها در پیوند است. چگالی حالت‌های اربیتالهای S و P اتم سطحی Si در شکل ۱۰ نشان دهنده شرکت اربیتال P در پیوند با اتمهای سرب است. چگالی حالت‌های مولفه‌های x و y اربیتال P اتم سطحی Si با مولفه z اربیتال P این اتم که در

مساحت E^f ، که عبارت است از انرژی شکل گیری سطح Pb/Si، از رابطه زیر به دست می‌آید که در آن E^{slab} انرژی کل ابر یاخته، N_{Pb} ، E_{Pb}^{bulk} و N_{Si} ، E_{Si}^{bulk} به ترتیب تعداد اتمهای سرب، انرژی انبوه سرب، تعداد اتمهای سیلیکون و انرژی انبوه سیلیکون می‌باشد. در حالت سیلیکون (سرب) خالص $N_{Pb} = 0$ و $N_{Si} = 0$ می‌شود و کمیت فوق همان انرژی سطح سیلیکون (سرب) است.

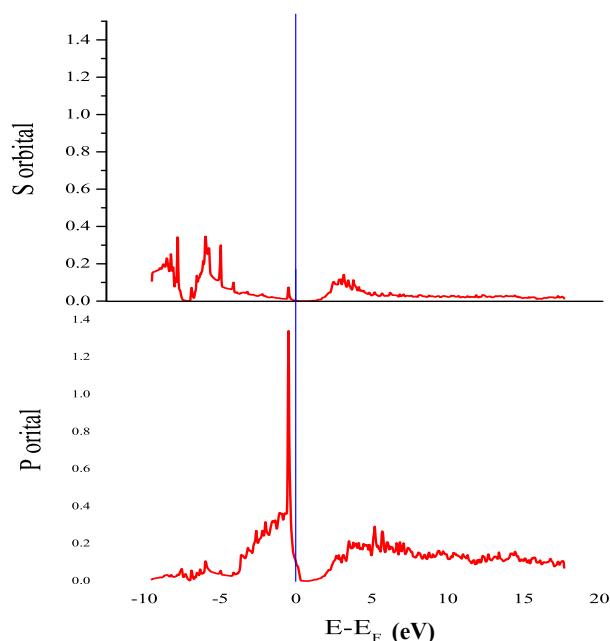
$$E^f = \frac{1}{2} (E^{slab} - N_{Pb} E_{Pb}^{bulk} - N_{Si} E_{Si}^{bulk}) \quad (3)$$

۳.۳.۳. بررسی چگالی حالات سطح مشترک Pb/Si(۱۱۱)

چگالی حالت‌های اربیتالهای S و P اتم سرب در شکل ۸ رسم شده است. مقایسه چگالیها نشان می‌دهد که اربیتال S اتم سرب



شکل ۱۱. منحنی چگالی حالت مولفه‌های P_z و $P_x + P_y$ اتم سطحی Si در Pb/Si(۱۱۱).

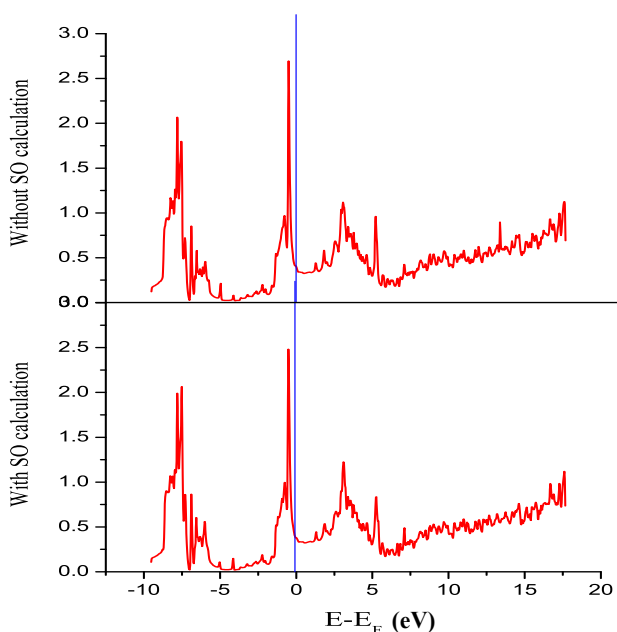


شکل ۱۰. منحنی چگالی حالت اربیتالهای S و P برای اتم سطحی Si در Pb/Si(۱۱۱).

شکل ۱۱ نشان داده شده است، نیز مانند اتم سرب گواه شرکت مولفه z این اربیتال در پیوند است. این شکل تأییدی بر نتیجه آخر بخش (۲.۲.۳) نیز می‌باشد.

۴. نتیجه‌گیری

نتایج مربوط به انرژی کل فازهای مختلف نشان می‌دهند که فاز T۱ نسبت به فازهای دیگر از انرژی پایین‌تری برخوردار است. لذا این فاز، پایدارترین فاز می‌باشد و در لایه نشانی اتمها ترجیح می‌دهند که در این فاز بر روی اتمهای زیر لایه بنشینند. این نتیجه با مشاهدات تجربی [۲۱ و ۲۲] و نتایج محاسباتی دیگر به روش شبه پتانسیل در توافق است [۴ و ۲۳]. در این حالت همه پیوندهای آزاد Si اشباع می‌شود. در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار باعث کاهش به مقدار کم در مقادیر انرژی، تابع کار و انرژی تشکیل سطح، نسبت به محاسبات بدون این تصحیح می‌شود. در شکل ۱۲ منحنی چگالی حالات کل در هر دو نوع محاسبه مقایسه شده‌اند، که نشان دهنده تغییرات کم چگالی حالات در هر دو نوع محاسبه می‌باشد. برهم‌کنش اسپین-مدار رابطه مستقیمی با عدد کوانتمی l دارد.



شکل ۱۲. منحنی چگالی حالت کل در دو حالت با برهم‌کنش اسپین-مدار و بدون برهم‌کنش اسپین-مدار در Pb/Si(۱۱۱).

اربتالهای d اتم سرب که دارای عدد کوانتمی بزرگ l می‌باشند پر بوده و در رسانش و پیوند شرکت نمی‌کنند و لذا اثر این اربیتالها در خواص الکترونی سرب بسیار کم می‌باشد. در نتیجه

پیوند Si-Pb از نوع σ می باشد.

سپاسگزاری

از تحصیلات تکمیلی دانشگاه اصفهان به خاطر حمایتهايش سپاسگزاريم.

این برهم کنش تأثیر زیادی در تغییر چگالی حالات و کمیت های مختلف فیزیکی دیگر ندارد. با توجه به شرکت مولفه های Z یا $m = \pm 1$ از اربیتال های P اتم های سطحی سرب و سیلیکون و در نظر داشتن این که راستای محور Z عمود بر سطح می باشد، اربیتال های P_z از دو سر دمبلی شکل خود همپوشانی دارند و لذا

مراجع

1. P Czoschke, H Hong, L Basile and T-C Chiang, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 075402.
2. P Czoschke, H Hong, L Basile and T-C Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 226801.
3. F J Himpsel, *J. Phys. Condense. Matter* **11** (1999) 9483.
4. T L Chan, C Z Wang, M Hupalo, M C Tringides, Z Y Lu and K M Ho, *Phys. Rev. B* **68** (2003) 045410.
5. X Tong, K Horikoshi and S Hasegawa, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 5653.
6. J Slezak, P Mutombo and V Chab, *Surf. Sci.* **584** (2000) 454.
7. O Custance, I Brihuega, J Y Veuillen, J M Go'mez-Rodriguez, and A M. Baro', *Surf. Sci.* **878** (2001) 482.
8. P Blaha, K Schwarz, G K H Madsen, D Kvasnicka, and J Luitz, WIEN2K, "An Augmented Plane Waves + Local Orbitals Program for Calculating Crystal properties", Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
9. F Hohenberg and W Kohn, *Phys. Rev. B* **136** (1964) B864.
10. J P Perdew, K Burke and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
11. Z Wu and R E Cohen, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 235116.
12. L Hedin and B I Lundqvist, *J. Phys. C* **4** (1971) 2064.
13. D Yu and M Scheffler, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 155417.
14. P E V Camp, V E V Doren and J T Devreese, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 12675.
15. M Palumbo, G Onida, R Del Sole and M Corradini, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 11329.
16. A G Beattie and J E Schirber, *Phys. Rev. B* **1** (1970) 1548.
17. Y K Vohra and A L Ruoff, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 8651.
18. C Kumpf, O Bunk, J H Zeysing, M M Nielsen, M Nielsen, R L Johnson and R Feidenhans'l, *Surf. Sci.* **448** (2000) L213.
19. J L Da Silva, C Stampfl and M Scheffler, *Surf. Sci.* **600** (2006) 703.
20. T-L Chan, C Z Wang, M Hupalo, M C Tringides, and K M Ho, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 226102.
21. J Tersoff and D R Hamann, *Phys. Rev. B* **31** (1985) 805.
22. I S Hwang, R E Martinez, C Liu and J A Golovchenko, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 10193.
23. S Brochard, E Artacho, O Custance, I Brihuega, A M Baro', J M Soler and J M Go'mez- Rodriguez, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 205403.