

УДК 539.2.01:535.2

Н. Ю. ТРИФОНОВ

**ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ  
ТВЕРДОГО ТЕЛА С ПРИМЕСЬЮ ЗАМЕЩЕНИЯ***(Представлено академиком АН БССР Б. Б. Бойко)*

В последние годы значительное развитие получили экспериментальные и теоретические исследования электронной структуры поверхностей твердых тел. Стимулом для этих работ являются нужды быстро развивающихся технических приложений, таких, как микроэлектроника, катализ и электрокатализ, защита металлов от коррозии. Все это вызвало и появление новых эффективных экспериментальных методов (в первую очередь модуляционной спектроскопии поверхности, разрешенной по углам фотоэмиссии, дифракции медленных электронов и др.), которые позволяют получать однозначную информацию о спектрах электронных и колебательных состояний на поверхности и об их зависимости от адсорбции и внешних полей [1]. В связи с этим возникает потребность в корректной физической теории для описания микроскопической структуры поверхностей. В частности, весьма актуальным представляется расчет изменений плотности электронных состояний на поверхности, вызываемых адсорбцией.

В настоящей работе аналитически вычислена плотность одноэлектронных состояний на поверхности твердого тела в ситуации, когда адсорбированные атомы (адатомы) случайным образом заполняют некоторую фиксированную решетку. Узлы такой решетки отвечают энергетически наиболее выгодным положениям отдельных не взаимодействующих адатомов и представляют собой минимумы потенциального рельефа в эквивалентных адсорбционных центрах. Подобная ситуация реализуется, например (до определенных значений степеней покрытия), при адсорбции различных газов на графите.

Как правило, парное взаимодействие между адсорбированными на поверхности частицами (атомами или молекулами) характеризуется экспоненциальным (или асимптотически сходящимся к такому) убыванием с ростом латерального расстояния  $r$  между ними. Именно это обстоятельство позволяет использовать для конструктивной систематики собственных значений задачи (энергетических уровней адатомов) метод И. М. Лифшица [2]. В целом данная работа следует одномерным вычислениям из [3].

Предположим, что адатомы занимают на поверхности лишь положения, образующие двумерную решетку (2-решетку). При этом пусть их концентрация  $c = (a/l)^2$  ( $a$  — характерный параметр решетки,  $l$  — среднее расстояние между адатомами) будет мала:

$$ac^{-1/2} \gg 1. \quad (1)$$

(Малость концентрации связана с короткодействием парного потенциала и в случае конкретного его вида может оказаться несущественной для наших вычислений.) Дискретный спектр такого 2-кристалла с при-

месями замещения как обычно определяется нулями детерминанта системы линейных алгебраических уравнений для матричных элементов функции Грина в узельном представлении. Если ввести энергию  $E = E_0 + \varepsilon$ , где  $E_0$  — положение уровня, образуемого единственным адатомом (ниже будет рассматриваться именно окрестность этого уровня — так называемая примесная зона), то интересующий детерминант с учетом (1) примет вид

$$\det \left| \varepsilon \delta_{ij} + \frac{1}{\sqrt{r_{ij}}} e^{-\beta r_{ij}} (1 - \delta_{ij}) \right| = 0. \quad (2)$$

(При этом удобно использовать безразмерные переменные: расстояние  $r_{ij}$ , выраженное в характерных параметрах решетки  $a$ , причем считать  $\hbar^2/2m = 1$ .)

Примесная зона плотности состояний (ПС) определяется в основном [2] парными уровнями, образованными близкорасположенными парами адатомов. Так как ПС обладает свойством самоусредняемости, то, рассматривая поверхность в термодинамическом пределе, можно выделить область вокруг одной такой пары адатомов и подсчитать ПС в ней, распространив затем результат на всю 2-систему.

Разлагая детерминант (2) в ряд по степеням малости энергетического параметра  $\varepsilon$  и оставляя лишь главные при  $\beta r_{ij} \gg 1$  члены, получаем выражение для энергии уровня, порождаемого двумя адатомами, разделенными расстоянием  $r \ll c^{-1/2}$ , и смещенного за счет взаимодействия с ближайшими к этой паре адатомами (находящимися на расстоянии  $R \sim c^{-1/2}$ ):

$$\varepsilon_{\pm} = \pm \left[ \frac{1}{\sqrt{r}} e^{-\beta r} + \frac{\sqrt{r}}{2R} e^{-\beta(2R-r)} \right]. \quad (3)$$

Дискретное множество парных уровней по обе стороны от уровня единственного адатома  $E_0$  ( $\varepsilon = 0$ ) размывается, и в соответствии с геометрической трактовкой ПС (см. [2]) основной вклад в ПС в окрестности рассматриваемого парного уровня дают кластеры трех ближайших адатомов, а ПС выражается универсальной формулой, не зависящей от размерности системы:

$$\rho(\varepsilon) = c^3 e^{-cS(\varepsilon)} \left| \frac{dS(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|, \quad (4)$$

где  $S(\varepsilon)$  — площадь, вне которой лежит любой адатом, не принадлежащий к рассматриваемой паре.

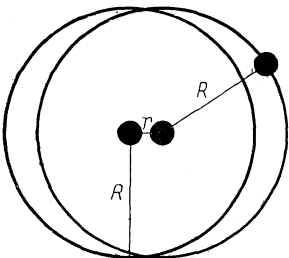
Искомая площадь  $S(\varepsilon)$  изображена на рисунке и численно равна

$$S(\varepsilon) = 2R^2 \arccos \left( \frac{r}{2R} \right) + Rr \sqrt{1 - \left( \frac{r}{2R} \right)^2}, \quad (5)$$

ПС выразится формулой

$$\rho(\varepsilon) \simeq \frac{2\pi c^3 R^2}{\beta \sqrt{r}} e^{\beta(2R-r) - c(\pi R^2 + 2Rr)}, \quad (6)$$

в которой зависимость  $R(\varepsilon)$  дается (3).



Минимальная площадь, занимаемая тремя соседними адсорбированными частицами

В заключение отметим, что полученное выражение для плотности состояний, помимо адсорбции в рамках решеточной модели, может описывать также другой тип двумерной электронной системы, а именно инверсионный слой, возникающий на поверхности полупроводника в МДП-структуре (металл—диэлектрик—полупроводник) при помещении ее в электрическое поле, загибающее дно валентной зоны ниже уровня Ферми в полупроводнике.

Автор благодарен акад. АН БССР Б. Б. Бойко за внимание к работе и М. И. Урбаху за полезные обсуждения.

### Summary

The density of states of adatoms randomly arranged in the nodes of a certain lattice on the solid surface is analytically calculated in pair levels region of the impurity band.

### Литература

1. Теория хемосорбции / Под ред. Дж. Смита.— М.: Мир, 1983.— 333 с. 2. Лифшиц И. М.— ЖЭТФ, 1963, т. 44, № 5, с. 1723—1741. 3. Трифонов Н. Ю.— ДАН БССР, 1983, т. 27, № 9, с. 801—804.

*Белорусский политехнический  
институт*

*Поступило 21.03.84*