

©1995

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 

В.М.Силкин, Е.В.Чулков

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения  
Российской академии наук,  
634048, Томск, Россия  
(Поступила в Редакцию 30 декабря 1994 г.  
В окончательной редакции 4 апреля 1995 г.)

Самосогласованным методом псевдопотенциала рассчитывается электронная структура поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ . Вычисления проводятся для двух типов поверхности: *A* и *B*. Тип *A* соответствует короткому расстоянию между поверхностным и вторым атомным слоем. Тип *B* определяется длинным первым межслоевым расстоянием. Показано, что в обоих случаях наблюдаются поверхностные состояния как в симметричных точках, так и вдоль линий высокой симметрии. В точках  $\bar{L}$  и  $\bar{A}$  обнаружено по два поверхностных состояния в широкой запрещенной щели. Занятое поверхностное состояние наблюдается в точках  $\bar{\Gamma}$  и  $\bar{M}$ . Энергии поверхностных состояний в точке  $\bar{A}$  практически не зависят от типа поверхности и составляют  $-2.9$  и  $-0.6$  eV относительно уровня Ферми. В других точках энергии поверхностных состояний проявляют существенную зависимость от типа поверхности. В точке  $\bar{\Gamma}$  энергии поверхностного состояния равны  $-4.2$  eV для поверхности *A* и  $-2.2$  eV для поверхности *B*. В точке  $\bar{M}$   $E_{\bar{M}(A)} = -3.4$  eV и  $E_{\bar{M}(B)} = -4.2$  eV. В точке  $\bar{L}$  энергии поверхностных состояний следующие:  $E_{\bar{L}(A)}^1 = -2.8$  eV,  $E_{\bar{L}(A)}^2 = -2.5$  eV и  $E_{\bar{L}(B)}^1 = -1.2$  eV,  $E_{\bar{L}(B)}^2 = -1.3$  eV. Рассчитанная величина  $N(E_F)$  плотности состояний на уровне Ферми для поверхностного слоя существенно превышает эту величину для объемного бериллия и превышает  $N(E_F)$  для поверхностного слоя  $\text{Be}(0001)$ . Следовательно, атомный слой поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  проявляет в большей степени металлический характер, чем поверхностный атомный слой  $\text{Be}(0001)$ , и значительно в большей степени, чем объемный  $\text{Be}$ .

Атом бериллия имеет простейшую электронную конфигурацию  $1s^2 2s^2 2p^0$ . В то же время металлический  $\text{Be}$ , относящийся к простым металлам, проявляет необычные свойства, которые выделяют его из этого ряда металлов [1]. В частности, гексагональное отношение  $c/a$  в бериллии меньше идеального 1.63, в то время как в остальных переходных металлах  $c/a > 1.63$ . Однако наибольшие отличия по сравнению с другими металлами наблюдаются для поверхности бериллия. Электронная структура поверхности  $\text{Be}(0001)$  определяется необычно широкими запрещенными щелями и высокой степенью локализации поверхностных состояний в поверхностном атомном слое [2-5]. В противоположность многим материалам на поверхности  $\text{Be}(0001)$  наблюдается увеличение расстояния между поверхностным и вторым атомным слоями [5,6]. Расчет методом погруженного атома релаксации поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  [7] показал, что первое межслоевое расстояние на этой

поверхности должно увеличиться на 8%. Исследования фононных мод на поверхности  $\text{Be}(0001)$  [8] показали, что особенности динамики этой поверхности определяются большой величиной плотности поверхностных состояний на уровне Ферми. Из непреходных металлов реконструкция поверхности имеет место только для  $\text{Be}(11\bar{2}0)$  и  $\text{Mg}(10\bar{1}0)$  [1,9]. Аномально большие и отрицательные остовные сдвиги наблюдаются для трех поверхностей бериллия с низкими индексами:  $(0001)$ ,  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}0)$  [10-12]. Большая величина и знак остовных сдвигов, обнаруженных на трех первых атомных слоях  $\text{Be}(0001)$  [10], могут быть объяснены наличием поверхностных состояний, дающих высокую плотность состояний на  $E_F$  [13]. Способствующим фактором также может служить отсутствие в остове  $p$ -орбиталей [14]. Таким образом, многие свойства поверхности  $\text{Be}(0001)$  связаны с поверхностными состояниями, определяющими высокую плотность состояний на уровне Ферми [4]. Электронная структура поверхности  $\text{Be}(0001)$  исследовалась как теоретически, так и экспериментально [2-5]. В то же время для поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  отсутствуют какие-либо исследования поверхностных состояний. В связи с этим нами был проведен самосогласованный псевдопотенциальный расчет электронной структуры этой поверхности, результаты которого представляются в настоящей работе.

## 1. Метод расчета

Электронная структура поверхности вычислялась в модели тонких пленок, периодически повторяющихся в направлении, перпендикулярном плоскости поверхности, и разделенных вакуумными промежутками. Ширина вакуумного промежутка выбиралась такой, чтобы соседние пленки не взаимодействовали друг с другом. Расчеты проводились для пленок толщиной 12 и 14 атомных слоев. Для вычисления зарядовой плотности, потенциала и одноэлектронных состояний использовался самосогласованный псевдопотенциальный метод. Нелокальный псевдопотенциал, сохраняющий норму, генерировался согласно [15,16], исходя из конфигурации  $2s^1 2p^1$  свободного атома. Псевдопотенциал ионов пленки определялся как суперпозиция псевдопотенциалов отдельных ионов. Одноэлектронное уравнение Шредингера решалось самосогласованным образом. Итерирование проводили до тех пор, пока разность между фурье-образами входящего и выходящего потенциалов не становилась меньше  $10^{-3}$  а.е. Обменно-корреляционный потенциал вычислялся в приближении локальной плотности [17,18]. В качестве базисных функций для разложения волновой функции использовались плоские волны, количество которых позволило получить одноэлектронные энергии с точностью  $0.1 \text{ eV}$ .

## 2. Кристаллическая структура

На рис. 1,а представлена кристаллическая решетка гексагонального бериллия, а также показана двумерная элементарная ячейка атомного слоя с ориентацией  $(10\bar{1}0)$ . На рис. 1,б изображены соответствующие зоны Бриллюэна. Как следует из рис. 1,а, расстояние между ближайшими атомными слоями с ориентацией  $(10\bar{1}0)$  не остается по-

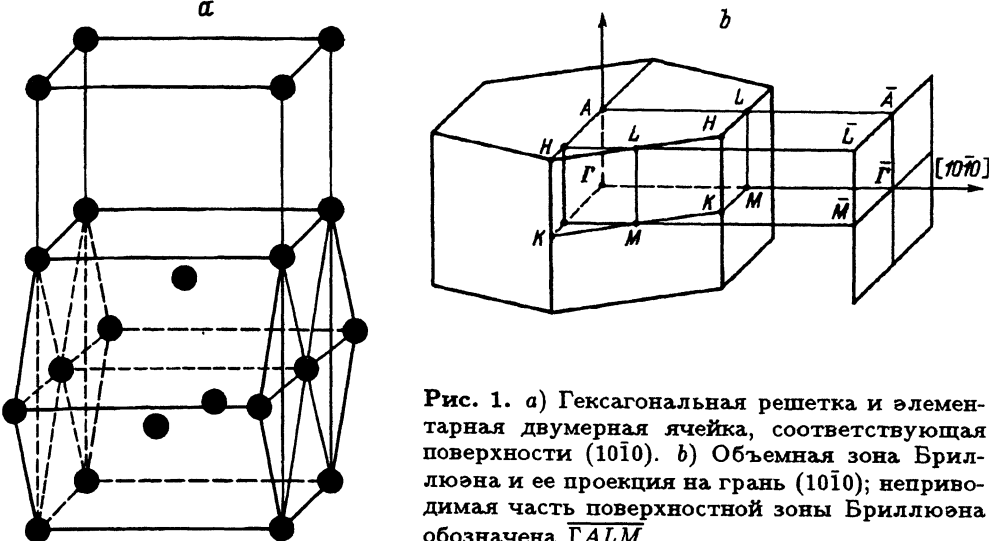


Рис. 1. а) Гексагональная решетка и элементарная двумерная ячейка, соответствующая поверхности  $(10\bar{1}0)$ . б) Объемная зона Бриллюэна и ее проекция на грань  $(10\bar{1}0)$ ; неприводимая часть поверхностной зоны Бриллюэна обозначена  $\bar{\Gamma}ALM$ .

стоянным, как в случае плоскости с ориентацией  $(0001)$ . Вдоль направления  $(10\bar{1}0)$  имеются короткое (длиной  $l$ ) межслоевое расстояние и длинное ( $2l$ ), последовательно чередующиеся между собой. Поэтому при образовании кристалла со свободной поверхностью  $(10\bar{1}0)$  возможны два варианта обрыва. Тип  $A$  поверхности образуется, когда обрыв (раскол кристалла) происходит по межслоевому промежутку с длиной  $2l$ . В этом случае расстояние между поверхностным и вторым слоем является коротким. Тип  $B$  образуется при обрыве кристалла по короткому межслоевому расстоянию. Мы провели расчет для обоих типов поверхности. Для исследования зависимости результатов от релаксации поверхности вычисления проводились также для поверхности типа  $A$  с увеличенным на 10% первым межслоевым расстоянием. Выбор такой величины представляется достаточно разумным, поскольку обычно изменения межслоевого расстояния для металлических поверхностей с низкими индексами лежат в пределах 0–10% [7,19,20]. В отличие от поверхностей многих металлов для поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  следует ожидать увеличения первого межслоевого расстояния, поскольку обрыв кристалла по длинному межслоевому расстоянию приводит к возникновению сил, сдвигающих поверхностный атомный слой в сторону вакуума. Это подтверждается результатами расчета [7]. Выбор поверхности типа  $A$  с целью исследования зависимости электронной структуры от релаксации связан с тем, что, согласно расчету [7], эта поверхность обладает меньшей поверхностной энергией, чем поверхность типа  $B$ , что свидетельствует о большой устойчивости структуры типа  $A$ .

Расчет поверхности типа  $A$  проводился на примере двенадцатислойной пленки, а полуограниченный кристалл с поверхностью типа  $B$  имитировался четырнадцатислойной пленкой. Для анализа зависимости получаемых результатов от толщины пленки вычисления также проводились для пленки с поверхностью типа  $A$ , состоящей из двадцати атомных слоев. Сравнение результатов расчета показало, что при переходе от двенадцатислойной пленки к двадцатислойной пленке энергии поверхностных состояний изменяются меньше чем на 0.1 eV.

На рис. 2 для поверхности типа А показаны истинные и резонансные поверхностные состояния вместе с проекцией (заштрихованная область и энергетические щели) зонной структуры объемного бериллия вдоль линий симметрии двумерной зоны Бриллюэна. Как видно из этого рисунка, в проекции для поверхности  $(10\bar{1}0)$  имеется широкая энергетическая щель в окрестности точек  $\bar{L}$  и  $\bar{A}$ , пересекаемая уровнем Ферми. В точке  $\bar{\Gamma}$  в области занятых состояний наблюдается узкая щель, распространяющаяся вдоль направления  $\bar{\Gamma}\bar{M}\bar{L}$  практически до точки  $\bar{L}$ . При смещении то точки  $\bar{\Gamma}$  к  $\bar{A}$  щель быстро исчезает. В верхней части этой запрещенной щели в  $\bar{\Gamma}$  имеется поверхностное состояние, которое распространяется вдоль направления  $\bar{\Gamma}\bar{M}$ . Вдоль  $\bar{\Gamma}\bar{A}$  оно быстро превращается в объемное состояние в полном соответствии с поведением щели в этом направлении. Симметрия этого состояния в  $\bar{\Gamma}$  определяется вкладами  $s$ -,  $p_z$ -типа. На верхний слой атомов приходится 50% заряда состояний. Энергия состояний в точке  $\bar{\Gamma}$  составляет  $-4.2\text{eV}$  относительно уровня Ферми. На рис. 3 показано пространственное распределение зарядовой плотности рассматриваемого состояния в гексагональной плоскости  $(0001)$ , проходящей через поверхностный слой атомов. В этой плоскости располагаются только атомы первого, третьего и пятого атомных слоев. Из рис. 3 видно, что зарядовая плотность медленно уменьшается при удалении от

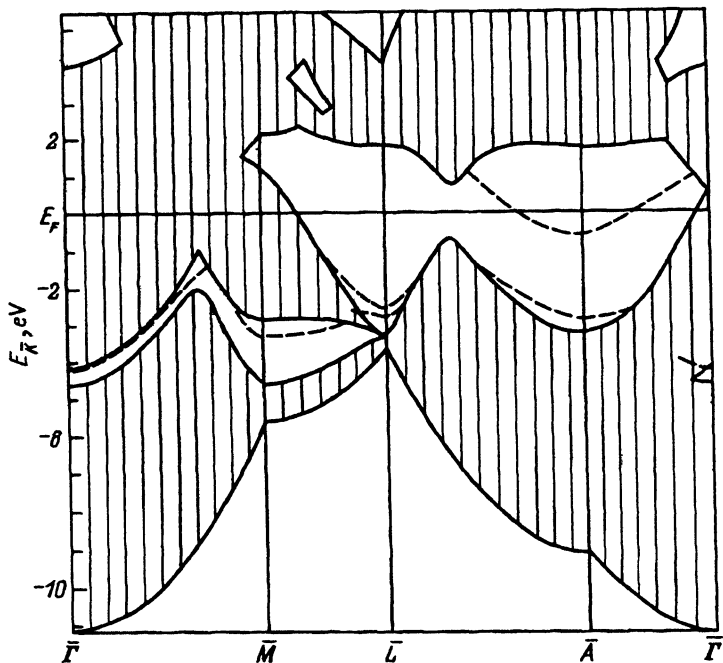


Рис. 2. Электронная структура поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  для поверхности типа А. Штриховыми линиями изображены поверхностные состояния. Заштрихованная область и запрещенные щели — проекция электронных состояний объемного Ве вдоль линий симметрии поверхностной зоны Бриллюэна.

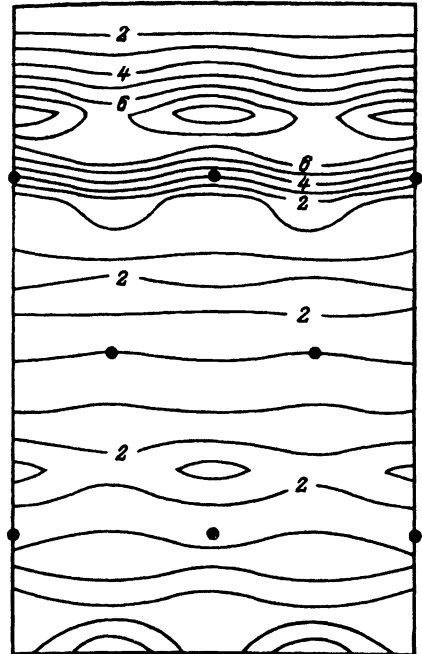


Рис. 3. Контурное изображение распределения зарядовой плотности поверхностного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  в плоскости (0001).

Плотность приведена в  $10^{-3}$  а.е.

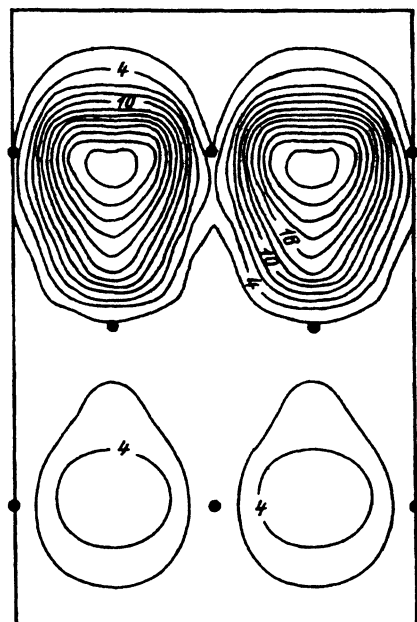


Рис. 4. Контурное изображение распределения зарядовой плотности поверхностного состояния в точке  $\bar{M}$  в плоскости (0001).

Плотность приведена в  $10^{-3}$  а.е.

поверхности в глубь кристалла. Подобное поведение зарядовой плотности наблюдается для поверхностного состояния, расположенного в узкой энергетической щели (шириной  $\sim 0.6$  eV) в точке  $\bar{\Gamma}$  на поверхности Mg(0001) [4,21].

В запрещенной щели в точке  $\bar{M}$  наблюдается поверхностное состояние с энергией  $-3.35$  eV. Орбитальный состав этого состояния определяется вкладами  $p_x$ -симметрии на атомах верхнего слоя и  $s$ -симметрии на атомах второго слоя. На рис. 4 показано распределение зарядовой плотности состояния в плоскости (0001), проходящей через верхний слой атомов. Из этого рисунка видно, что зарядовая плотность располагается преимущественно в двух верхних атомных слоях (до 70% заряда состояния приходится на эти два слоя). При удалении от точки  $\bar{M}$  в направлении  $\bar{M}\bar{\Gamma}$  это состояние движется к верхнему краю щели и превращается в объемное состояние. В направлении  $\bar{M}\bar{L}$  это состояние превращается в объемное на расстоянии  $\sim 0.7|\bar{M}\bar{L}|$ . Интересно, что характер запрещенной щели и поведение поверхностных состояний вдоль  $\bar{\Gamma}\bar{M}\bar{L}$  напоминают соответствующие характеристики поверхности Al(001) [22]. Основное отличие связано с тем, что поверхностные состояния на Al(001) в точках  $\bar{\Gamma}$  и  $\bar{X}$  лежат вблизи нижнего края запрещенной щели.

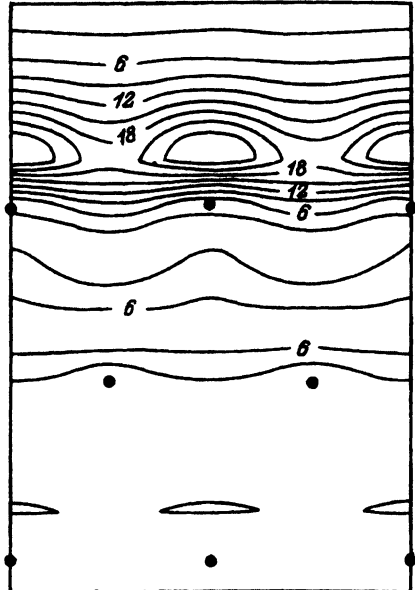
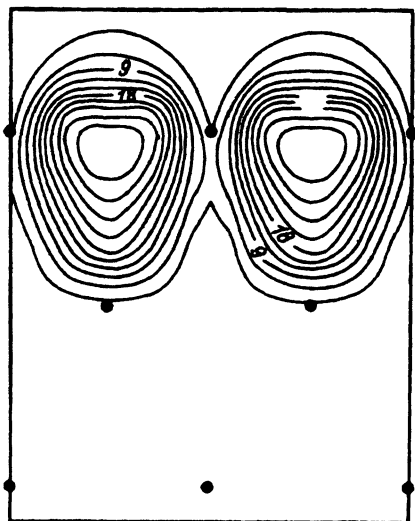


Рис. 5. Контурное изображение распределения зарядовой плотности нижнего поверхностного состояния в точке  $\bar{L}$  в плоскости (0001).

Плотность приведена в  $10^{-3}$  а.у.

Рис. 6. Контурное изображение распределения зарядовой плотности верхнего поверхностного состояния в точке  $\bar{A}$  в плоскости (0001).

Плотность приведена в  $10^{-3}$  а.у.

В точке  $\bar{L}$  наблюдаются два поверхностных состояния с энергиями  $-2.8$  и  $-2.5$  eV. Практически вся зарядовая плотность этих состояний приходится на два поверхностных слоя. Это иллюстрируется рис. 5, где показано пространственное распределение зарядовой плотности нижнего состояния в плоскости (0001), проходящей через верхний слой атомов. Симметрия этого состояния определяется вкладами  $p_x$ -типа на атомах верхнего слоя и вкладами  $p_y$ -типа на атомах второго слоя. Орбитальный состав верхнего состояния есть  $p_y$  на атомах поверхностного слоя и  $p_x$  на атомах второго слоя. При смещении волнового вектора от точки  $\bar{L}$  вдоль направлений  $\bar{LM}$  и  $\bar{LA}$  оба состояния попадают в область объемных состояний и быстро теряют поверхностный характер.

В точке  $\bar{A}$ , как и в точке  $\bar{L}$ , имеются два занятых поверхностных состояния с энергиями  $-2.9$  и  $-0.6$  eV. До 60% заряда нижнего состояния локализуется в двух верхних атомных слоях. На атомах верхнего слоя, на который приходится 50% заряда, это состояние характеризуется симметрией  $p_y$ -типа. Верхнее состояние имеет более выраженный поверхностный характер: на поверхностный слой атомов приходится до 70% заряда состояния. На рис.6 приведено контурное изображение зарядовой плотности этого состояния. Из этого рисунка видно, что значительная часть зарядовой плотности состояния локализуется над верхним атомным слоем. Орбитальный состав состояния определяется  $s$ -,  $p_x$ -вкладами. Интересно, что оба поверхностных состояния довольно далеко распространяются вдоль направлений  $\bar{AG}$  и  $\bar{AL}$ . Поэтому они способны дать существенный вклад в плотность состояний.

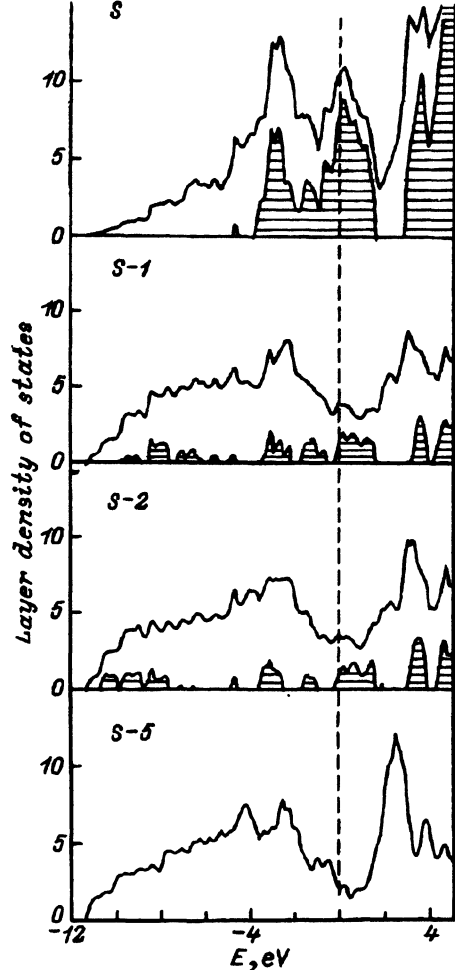


Рис. 7. Плотность электронных состояний по слоям для двенадцатислойной пленки  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ , соответствующей поверхности типа А.

Символы  $S, S-1, \dots$  обозначают соответственно поверхностный, первый предповерхностный, ... атомные слои.

Для анализа зависимости электронных поверхностных состояний от релаксации поверхности мы провели расчет для поверхности типа А с увеличенным на 10% первым межслоевым расстоянием. Оказалось, что релаксация практически не влияет на положение и орбитальный состав поверхностных состояний. Их энергия изменяется на 0.01–0.02 eV.

На рис. 7 приведена рассчитанная плотность электронных состояний (LDOS) для отдельных слоев пленки  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  типа А. Заштрихованная область показывает положительную часть разности плотности состояний данного слоя и центрального слоя. В качестве плотности состояний центрального слоя выбрана плотность состояний шестого атомного слоя. Из рис. 7 видно, что плотность состояний этого слоя, типичная для объемного бериллия, характеризуется низкой величиной на уровне Ферми. В то же время плотность состояний для поверхностного слоя имеет несколько больших пиков, один из которых приходится на уровень Ферми. Величина плотности состояний на уровне Ферми для поверхностного слоя почти в 5 раз превышает соответствующую

величину для центрального слоя атомов. Такое превышение определяется в основном сильно локализованным поверхностным состоянием в точке  $\bar{A}$ . Пик, соответствующий энергии  $\sim -3\text{eV}$ , определяется двумя поверхностными состояниями в точке  $\bar{L}$  и нижним поверхностным состоянием в точке  $\bar{A}$ . Из рис. 7 следует, что поверхностные состояния дают вклад в LDOS на уровне Ферми на втором и на третьем атомных слоях.

Сравнение электронной структуры поверхностей непереходных металлов [ $^{2-4,22-24}$ ] с настоящими результатами показывает необычный характер электронной структуры  $\text{Ve}(10\bar{1}0)$ . Два занятых поверхностных состояния в одной запрещенной щели обнаружены только на поверхности  $\text{Ve}(0001)$  в точке  $\bar{M}$ . Причем нижнее из этих состояний имеет слабо выраженный поверхностный характер. Максимум его зарядовой плотности располагается в окрестности третьего атомного слоя. Поэтому вклад в плотность состояний верхнего слоя от данного состояния мал. В то же время на поверхности  $\text{Ve}(10\bar{1}0)$  по два поверхностных состояния, локализующихся преимущественно в двух верхних слоях, наблюдаются в двух симметричных точках  $\bar{A}$  и  $\bar{L}$ . Все эти состояния вносят существенные вклады в плотность состояний поверхностного слоя и могут определять химическую активность поверхности  $\text{Ve}(10\bar{1}0)$ , ее динамические характеристики, величины сдвигов основных электронов [ $^{11}$ ] и другие свойства.

Для поверхности типа  $B$  рассчитанные поверхностные и резонансные состояния показаны на рис. 8. Из этого рисунка следует, что при

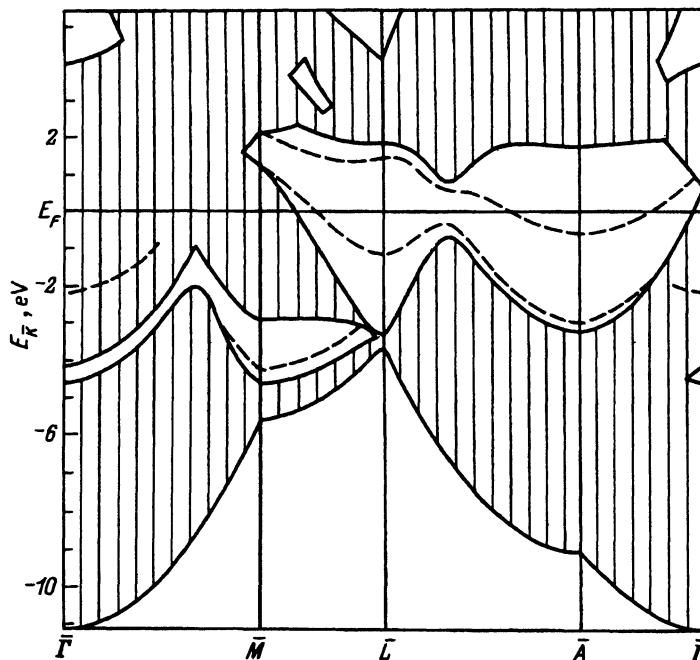


Рис. 8. Электронная структура поверхности  $\text{Ve}(10\bar{1}0)$  для поверхности типа  $B$ . Штриховыми линиями изображены поверхностные состояния. Заштрихованная область и запрещенные зоны — проекция электронных состояний объемного  $\text{Ve}$  вдоль линий симметрии поверхностной зоны Бриллюэна.



переходе от поверхности типа  $A$  к поверхности типа  $B$  количество поверхностных состояний не изменяется, но происходят качественные изменения в электронной структуре. В частности, занятое поверхностное состояние в точке  $\bar{\Gamma}$  смещается из запрещенной щели в область объемных состояний. Энергия этого состояния равна  $-2.2\text{eV}$ . Иная ситуация наблюдается в точке  $\bar{M}$ . В этой точке при переходе от поверхности  $A$  к поверхности  $B$  происходит смещение поверхностного состояния по энергии в пределах запрещенной щели. В  $\bar{M}$  энергия данного состояния составляет  $-4.2\text{eV}$ . До 85% заряда состояния локализуется в трех верхних слоях атомов.

Небольшие изменения электронной структуры происходят в точке  $\bar{L}$ . Верхнее поверхностное состояние становится полностью незанятым. Вдоль направления  $\bar{LMA}$  оно переходит в верхнее поверхностное состояние в точке  $\bar{A}$ . Его энергия в  $\bar{L}$  составляет  $1.3\text{eV}$ . Анализ распределения зарядовой плотности состояния показывает, что при переходе от поверхности  $A$  к поверхности  $B$  поверхностный характер состояния усиливается. На верхний слой приходится до 50% заряда состояния, в то время как в случае поверхности  $A$  эта доля составляет около 30%. Симметрия состояния определяется вкладом  $p_y$ -типа на атомах верхнего слоя. Нижнее состояние в точке  $\bar{L}$  имеет энергию  $-1.2\text{eV}$ . В направлении  $\bar{LA}$  это состояние переходит в нижнее поверхностное состояние в точке  $\bar{A}$ , не выходя за пределы запрещенной щели. Орбитальный состав состояния на атомах верхнего слоя дается вкладом  $p_x$ -типа. Так же как и в случае верхнего состояния, при переходе от поверхности  $A$  к поверхности  $B$  усиливается поверхностный характер состояния.

В отличие от точек  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{M}$  и  $\bar{L}$  энергии состояний в точке  $\bar{A}$  практически не изменяются (их изменение составляет менее  $0.1\text{eV}$ ) при переходе от одной поверхности к другой. Орбитальный состав и распределение зарядовой плотности соответствуют таковым для поверхности типа  $A$ .

На рис. 9 показана рассчитанная плотность состояний по слоям для поверхности типа  $B$ . Из этого рисунка видно, что структура LDOS для поверхностного слоя имеет другой характер по сравнению с рис. 7. В частности, отсутствует первый большой пик в области занятых состояний, а пик в окрестности уровня Ферми значительно выше. Последнее связано со смещениями вверх по энергии поверхностных состояний в точке  $\bar{L}$  и усилением их поверхностного характера.

Анализ электронной структуры поверхностей непреходных металлов показывает, что если проекция объемной зонной структуры содержит в центре зоны Бриллюэна запрещенную щель, то, как правило, в такой щели наблюдается поверхностное состояние <sup>[1-5,16,21-28]</sup>. Исключения составляют поверхности свинца <sup>[23,24,29]</sup> и  $\text{Cd}(0001)$  <sup>[23,30]</sup>. Отсутствие поверхностного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  на поверхностях  $\text{Pb}(001)$ ,  $\text{Pb}(110)$  и  $\text{Pb}(111)$  объясняется тем, что нижний край запрещенной щели характеризуется  $s$ -симметрией, а верхний край определяется объемными состояниями  $p$ -симметрии. Поверхностное состояние в  $\bar{\Gamma}$  должно иметь характер висячей связи, т.е. определяться вкладами  $s$ -,  $p_z$ -типа. Из-за больших релятивистских эффектов в атоме свинца энергетическая щель между  $6s$ - и  $6p$ -состояниями оказывается настолько большой ( $3-4\text{eV}$ ), что возмущение, вызываемое образованием поверхности, не перемешивает волновые функции  $s$ - и  $p_z$ -типа. В

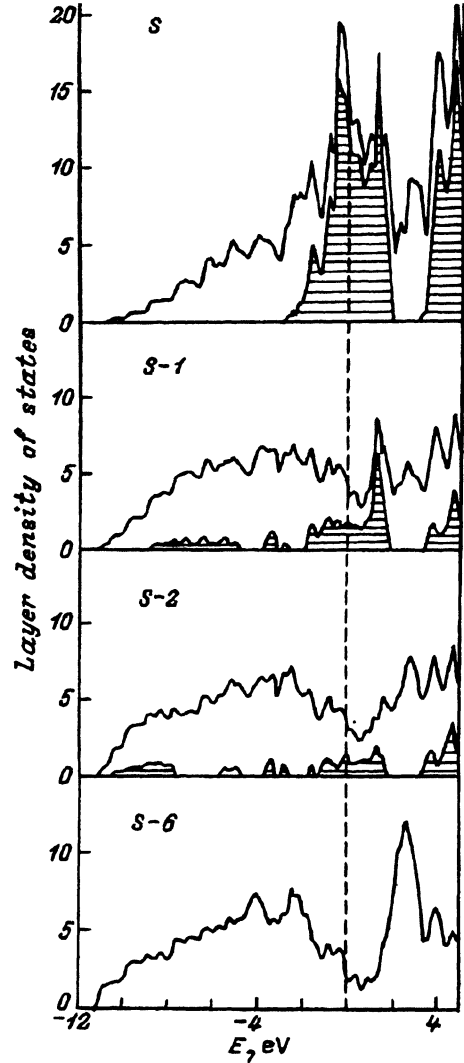


Рис. 9. Плотность электронных состояний по слоям для четырнадцатислойной пленки  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ , соответствующей поверхности типа  $B$ .

Символы  $S, S-1, \dots$  обозначают соответственно поверхностный, первый предповерхностный, ... атомные слои.

случае  $\text{Cd}(0001)$  отсутствие поверхностного состояния во многом связано с аномально большим гексагональным отношением осей [23]. На поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  в точке  $\bar{\Gamma}$  наблюдается поверхностное состояние  $s$ -,  $p_z$ -симметрии как для поверхности типа  $A$ , так и для поверхности типа  $B$ . Однако в первом случае поверхностное состояние локализуется в запрещенной щели (рис. 2), в то время как во втором случае оно лежит в области объемных состояний выше запрещенной щели на 2 eV. Если предположить, что поверхности бериллия следуют рассматриваемой для простых металлов тенденции (подтверждением чего является поверхность  $\text{Be}(0001)$ ), то можно думать, что реализующейся в экспериментах поверхностью  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  является поверхность типа  $A$ . Это согласуется с выводами [7].

В [31] было отмечено, что вследствие необычно большой плотности состояний на уровне Ферми на поверхности  $\text{Be}(0001)$  следует ожидать большой отрицательной величины остовных сдвигов на этой поверхности. Йонссон и др. [10-12] измерили остовные сдвиги на трех поверхностях  $\text{Be}(0001)$ ,  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  и  $\text{Be}(11\bar{2}0)$  и обнаружили anomalously большие и отрицательные сдвиги остовного состояния  $1s$  в поверхностном слое, которые уменьшались по абсолютной величине в последовательности  $(0001)$ ,  $(10\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2}0)$ . Более того, для поверхностей  $(0001)$  и  $(10\bar{1}0)$  сдвиги были обнаружены в первых трех атомных слоях. Все эти эффекты качественно объясняются [11] высокой плотностью состояний в первых трех атомных слоях [4,32]. Вычисления остовных сдвигов, проведенные для  $\text{Be}(0001)$  [13], подтвердили важную роль поверхностных состояний в формировании остовных сдвигов на поверхностях бериллия. Отношения плотности состояний на уровне Ферми в трех поверхностных слоях к соответствующей величине в объеме составляют для  $\text{Be}(0001)$  3.04, 2.30 и 1.58, для  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  4.92, 1.78 и 1.53. Для идеальной поверхности  $\text{Be}(11\bar{2}0)$  [32] это отношение для поверхностного слоя равно 2.0. Приведенные данные свидетельствуют о том, что на поверхности  $(10\bar{1}0)$  следует ожидать более высокой величины остовного сдвига, чем на поверхности  $(0001)$ . При переходе от более плотноупакованной поверхности к менее плотноупакованной обычно наблюдается увеличение остовных сдвигов [11]. Поверхность  $(10\bar{1}0)$  имеет меньшую плотность упаковки, чем поверхность  $(0001)$ . Настоящий расчет дает увеличение LDOS на уровне Ферми при переходе от  $\text{Be}(0001)$  к  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ . Тем не менее эксперимент [11] свидетельствует об уменьшении величины остовных сдвигов при таком переходе. Одной из возможных причин различия может служить наличие дефектов на поверхности. Другое возможное объяснение связано с тем, что на величину остовного сдвига влияют все занятые поверхностные состояния, а не только состояния, соответствующие энергии Ферми. Поэтому прямое сопоставление величины остовных сдвигов с величиной плотности состояний на  $E_F$  может не дать точного ответа. Во всяком случае для разрешения противоречия кажется необходимым проведение дополнительных теоретических и экспериментальных исследований.

Рассчитанная величина работы выхода  $\varphi$  для поверхности типа  $A$  получилась равной 4.4 eV, для поверхности типа  $B$  — 4.9 eV. Для  $\text{Be}(0001)$  самосогласованный расчет [4] дает  $\varphi = 5.4$  eV в согласии с экспериментальной величиной 5.1 eV [33]. Сравнение полученных значений  $\varphi$  для поверхностей бериллия показывает необычно большую анизотропию работы выхода, достигающую 20%. В то время как для поверхностей типичного неперегородного металла алюминия анизотропия работы выхода составляет 5% [34,35].

Таким образом, проведенный расчет выявил необычный характер электронной структуры поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$ . В отличие от других неперегородных металлов на поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  наблюдается по два поверхностных состояния в широкой запрещенной щели в симметричных точках  $\bar{A}$  и  $\bar{L}$  как для поверхности типа  $A$ , так и для поверхности типа  $B$ . Плотность состояний на уровне Ферми для  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  значительно выше соответствующей величины в объеме металла, что объясняет большую отрицательную величину остовных сдвигов на не-

скольких поверхностных слоях атомов. Более того, LDOS на  $E_F$  для  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  оказывается больше, чем LDOS на  $E_F$  для  $\text{Be}(0001)$ . Вычисленная величина работы выхода для поверхности типа  $A$  оказалась значительно меньше (на  $1\text{eV}$ ), чем работа выхода для поверхности  $\text{Be}(0001)$ . Для проверки необычных электронных характеристик поверхности  $\text{Be}(10\bar{1}0)$  желательно проведение фотоэмиссионного эксперимента с угловым разрешением.

#### Список литературы

- [1] Plummer E.W., Hannon J.B. *Progr. Surf. Sci.* **46**, 149 (1994).
- [2] Karlsson U.O., Flodstrom S.A., Engelhardt R., Gadeke W., Kohh E.E. *Solid State Commun.* **49**, 711 (1984).
- [3] Bartynski R.A., Jensen E., Gustafsson T., Plummer E.W. *Phys. Rev.* **B32**, 1921 (1985).
- [4] Chulkov E.V., Silkin V.M., Shirykalov E.N. *Surf. Sci.* **188**, 287 (1987).
- [5] Feibelman P.J. *Phys. Rev.* **B46**, 2532 (1992).
- [6] Davis H.L., Hannon J.B., Ray K.B., Plummer E.W. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2632 (1992).
- [7] Chen S.P. *Surf. Sci. Lett.* **264**, L162 (1992).
- [8] Hannon J.B., Plummer E.W. *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **64/65**, 683 (1993).
- [9] Hannon J.B., Plummer E.W., Wentzcovitch R.M., Lam P.K. *Surf. Sci.* **269/270**, 7 (1992).
- [10] Johansson L.I., Johansson H.I.P., Andersen J.N., Lundgren E., Nyholm R. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2453 (1993).
- [11] Johansson H.I.P., Johansson L.I., Lundgren E., Andersen J.N., Nyholm R. *Phys. Rev.* **B49**, 17460 (1994).
- [12] Johansson L.I., Johansson H.I.P., Andersen J.N., Lundgren E., Nyholm R. *Surf. Sci. Lett.* In press (1995).
- [13] Feibelman P.J. *Phys. Rev.* In press (1995).
- [14] Alden M., Skriver H.L., Johansson B. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2457 (1993).
- [15] Силкин В.М., Чулков Е.В., Скляднева И.Ю., Панин В.Е. *Изв. вузов. Физика*, **9**, 56 (1984).
- [16] Чулков Е.В., Силкин В.М., Ширыкалов Е.Н. *Физика металлов и металловедение.* **64**, 213 (1987).
- [17] Kohn W., Sham L.J. *Phys. Rev.* **A140**, 1133 (1965).
- [18] Hedin L., Lundqvist B.I. *J. Phys.* **C4**, 2062.
- [19] Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В. *Поверхность*, **6**, 23 (1994).
- [20] Берч А.В., Еремеев С.В., Липницкий А.Г., Скляднева И.Ю., Чулков Е.В. *ФТТ* **36**, **10**, 2935 (1994).
- [21] Chulkov E.V., Silkin V.M. *Solid State Commun.* **58**, 273 (1986).
- [22] Chulkov E.V., Silkin V.M. *Surf. Sci.* **215**, 385 (1989).
- [23] Chulkov E.V., Silkin V.M., Sklyadneva I.Yu. *Surf. Sci.* **231**, 9 (1990).
- [24] Chulkov E.V., Koroteev Yu.M., Silkin V.M. *Surf. Sci.* **247**, 115 (1991).
- [25] Karlsson U.O., Hansson G.V., Persson D.E.S., Flodstrom S.A. *Phys. Rev.* **B26**, 1852 (1982).
- [26] Bartynski R.A., Gaylord R.H., Gustafsson T., Plummer E.W. *Phys. Rev.* **B33**, 3644 (1986).
- [27] Chulkov E.V., Silkin V.M., Lipnitskii A.G., Panin V.E. *Electrochim. Acta.* **34**, 19 (1989).
- [28] Heinrichsmeier M., Fleszar A., Eguluz A.G. *Surf. Sci.* **285**, 129.
- [29] Wurde K., Mazur A., Pollmann J. *Phys. Rev.* **B49**, 7679 (1994).
- [30] Chauhan H.S., Pver L., Nilsson P.O., Kanski J., Karlsson K. *Phys. Rev.* **B48**, 4729 (1993).
- [31] Shek M.L., Hrbek J., Sham T.K., Xu G.Q. *Phys. Rev.* **B41**, 3447 (1990).
- [32] Силкин В.М., Чулков Е.В. *Поверхность*, **11**, 46 (1993).
- [33] Green A.K., Bauer E. *Surf. Sci.* **74**, L676 (1978).
- [34] Grepstad J.K., Gartland P.O., Slagsvold B.J. *Surf. Sci.* **57**, 348 (1976).
- [35] Gartland P.O. *Surf. Sci.* **62**, 183 (1977).