

Переходы металл–полупроводник, вызванные адсорбцией щелочных металлов на поверхности (001) кремния

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 5 августа 1999 г.
В окончательной редакции 11 октября 1999 г.)

С учетом косвенного и диполь-дипольного взаимодействий адатомов исследованы изменения электронной структуры поверхностного слоя полупроводниковой подложки. Найдены условия как возникновения, так и схлопывания щелей в зоне поверхностных состояний подложки в функции от степени покрытия поверхности адатомами. Результаты анализа использованы для объяснения переходов металл–полупроводник при адсорбции атомов цезия и натрия на поверхности (001) кремния.

Работа выполнена в рамках федеральной программы "Поверхностные атомные структуры".

Адсорбция атомов щелочных металлов (АМ — alkali metals) на поверхности полупроводников привлекает в последнее время пристальное внимание [1–5]. Наиболее изученной к настоящему времени является адсорбция АМ на поверхности (001) кремния, так как такая система является модельной для исследования металлизации поверхности полупроводников. Стало, однако, почти общепринятым начинать все публикации по этому вопросу с утверждений, что, несмотря на все усилия, не существует единой точки зрения на геометрию поверхности Si (001), наиболее выгодные места адсорбции, покрытие, соответствующее монослойному, и характер связи адсорбат–подложка. На наш взгляд, подобное утверждение излишне пессимистично. Действительно, в настоящее время большинство исследователей считает, что верхний слой Si (001) сформирован рядами асимметричных димеров Si–Si, образующих при комнатной температуре структуру 2×1 . Местами адсорбции атомов натрия, калия и цезия являются позиции *T3* и *HH* (рис. 1, см., например, [6,7] и ссылки, приведенные там). Монослойному покрытию соответствуют два атома АМ, приходящиеся на одну поверхностную ячейку 2×1 (модель двойных слоев Абукавы–Коно [8]), когда заполнены все позиции *T3* и *HH*. Следует, однако, отметить, что в случае адсорбции атомов лития возможна и другая геометрия адсорбционного слоя [9,10], так же как в случае низкотемпературной адсорбции Na [11] и Cs [12]. Что же касается природы связи АМ–адсорбат, то споры о том, ковалентная эта связь или ионная, не являются специфической проблемой адсорбции АМ на кремнии, а восходят к работе Ишиды по адсорбции АМ на металлах [13]. Нам представляется, что кажущаяся существенной разница в описании связи адатом–адсорбат как поляризованной ковалентной связи [7,13,14] и связи гетерополярной (ионной) [15–17], предложенной в классической работе Герни [18], возникает вследствие плохо определенного понятия эффективного заряда адатома. Поскольку адсорбция АМ на полупроводниковых поверхностях приводит к существенному понижению работы выхода ад-

сорбционной системы (см., например, [9,11,16]), логично считать связь адатом–адсорбат ионной.

Одним из наиболее интересных эффектов, вызываемых адсорбцией АМ, являются фазовые переходы металл–полупроводник ($M \rightarrow S$). Так, например, в системе Na, Cs/Si (001) такие переходы имеют место при изменении концентрации адатомов на поверхности [19–21]. Аналогичные переходы наблюдаются и на других подложках: Na, Cs/Si (111) [22], GaAs (110) [23] и карбиде кремния [24–27].

Хорошо известно, что при адсорбции на кремнии основную роль играют поверхностные состояния [1–5], которые располагаются внутри объемной запрещенной зоны и образуют две полосы, разделенные щелью. Эти полосы возникают вследствие π -взаимодействия оборванных sp^3 -орбиталей и соответствуют связывающему и антисвязывающему состояниям. При $T = 0$ нижняя

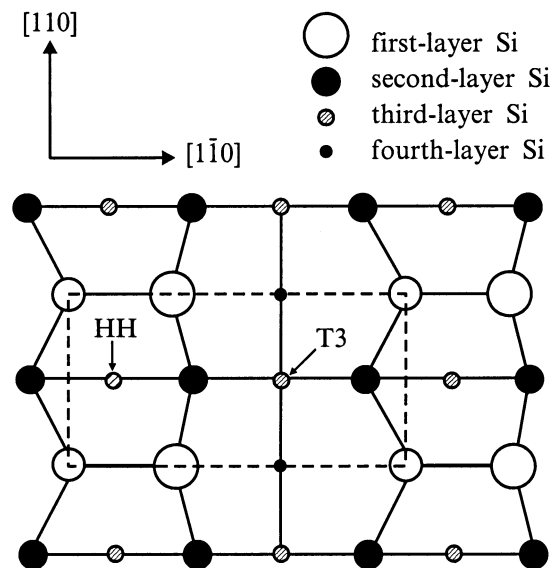


Рис. 1. Структура Si (001)–(2×1) с асимметричными димерами (по [7]). Штриховой линией обозначена элементарная поверхностная ячейка.

π -полоса заполнена, верхняя π^* -полоса пуста. В задаче об адсорбции можно ограничиться рассмотрением лишь незаполненной π^* -полосы, считая, что заселенность π -полосы в процессе адсорбции не изменяется сколько-нибудь существенно [16]. В такой постановке задача об адсорбции на полупроводниковой подложке ничем в принципе не отличается от задачи об адсорбции на узкозонном металле, что и будет использовано в дальнейшем.

Как правило, переходы $M \rightarrow S$ объясняются в рамках модели Хаббарда [6–10,12], где образование щели в полосе непрерывного спектра связывается с внутриатомным кулоновским отталкиванием U электронов на поверхностных атомах подложки. В настоящей работе мы, не прибегая к многочастичным эффектам, покажем, что щель возникает вследствие косвенного (через подложку) обмена электронами между адатомами [28]. Более того, учтя также диполь-дипольное отталкивание адатомов, мы найдем условия исчезновения ("схлопывания") щели.

1. Косвенный обмен и диполь-дипольное отталкивание в адсорбированном слое

Косвенное взаимодействие между одноэлектронными атомами, адсорбированными на металлической поверхности, рассматривалось нами в работах [29,30]. В [29] показано, что интегральная плотность состояний (т.е. плотность состояний бесструктурного слоя адатомов) в поверхностном слое субстрата ρ_s определяется выражением

$$\rho_s(\omega) = (1/\pi D)F(\omega),$$

$$F(\omega) = \arctg \{ [\omega + D - \theta V^2 / (\omega - \varepsilon_a)] / \gamma \} - \arctg \{ [\omega - D - \theta V^2 / (\omega - \varepsilon_a)] / \gamma \}. \quad (1)$$

Здесь ω — энергия, D и γ — параметры плотности состояний невозмущенного субстрата ρ_s^0 [31], которую можно представить в виде комбинации параллельной $\rho_{s\parallel}^0$ и перпендикулярной $\rho_{s\perp}^0$ составляющих

$$\rho_{s\parallel}^0 = \begin{cases} 1/2D, & |\omega| \leq D, \\ 0, & |\omega| > D, \end{cases} \quad \rho_{s\perp}^0 = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (2)$$

V — матричный элемент взаимодействия адатом-подложка, ε_a — энергия уровня адатома, θ — степень покрытия ($0 \leq \theta \leq 1$). Энергия отсчитывается от середины невозмущенной зоны подложки. При выводе выражений (2) предполагалось, что $\theta \neq 0$.

Теперь учтем диполь-дипольное отталкивание адатомов и будем считать, что оно приводит к неоднородному распределению электронной плотности в адсорбированном слое, т.е. к чередованию зарядов соседних адатомов $Z_{\pm} = Z(1 \pm c)$, где параметр порядка c — число, определяемое самосогласованным образом [32]. При

этом возникают (+)- и (-)-подрешетки адатомов. Можно показать, что энергия уровня адатома ε_a при этом расщепляется и переходит в

$$\varepsilon_a^{\pm} = \varepsilon_a' \pm \delta, \quad \delta = c\nu\xi\theta^{3/2}Z,$$

$$\varepsilon_a' = \varepsilon_a - \xi\theta^{3/2}Z, \quad \xi = 2e^2l^2N_{ML}^{3/2}A_0, \quad (3)$$

где безразмерные параметры A_0 и ν определяются геометрией решетки адатомов [32], e — заряд электрона, l — половина плеча поверхностного диполя, образованного адсорбированным ионом и его отражением в подложке, N_{ML} — концентрация адатомов в монослое. Заменяя ε_a в формулах (1) на ε_a^{\pm} , получим плотность состояний ρ_s^{\pm} . Такое состояние адсорбированного слоя и поверхностного слоя подложки будем называть неоднородным зарядовым распределением (NCD). В случае однородного зарядового распределения (UCD), т.е. при $c = 0$, энергии уровней ε_a^{\pm} переходят в ε_a' .

Для того чтобы проиллюстрировать, как под действием косвенного обмена и диполь-дипольного отталкивания адатомов видоизменяется плотность состояний адсорбционной системы, рассмотрим простой пример. Как следует из выражения (2), в пределе $\gamma \rightarrow 0$ зона невозмущенной (свободной от адатомов) подложки становится двумерной: плотность ее состояний представляет собой прямоугольник с высотой $(2D)^{-1}$, расположенный в энергетическом интервале $-D \leq \omega \leq D$. Такая модель соответствует простейшему описанию π^* -полосы поверхностных состояний Si (001).

Как следует из выражения (1), в состоянии UCD на шкале энергий существуют четыре характерные точки вида $(\varepsilon_a' - D \pm R'_{\pm})/2$, $(\varepsilon_a' + D \pm R'_{\pm})/2$, где $R'_{\pm} = \sqrt{(\varepsilon_a' \pm D)^2 + 4\theta V^2}$, определяющие границы подзон (см. далее). В состоянии NCD, когда каждый уровень ε_a' расщепляется на два уровня ε_a^{\pm} [32], число таких точек удваивается. В зависимости от соотношения входящих в эти выражения энергетических параметров характерные точки на шкале энергий могут располагаться в разной последовательности.

Рассмотрим предел

$$4\theta(V/D)^2 \ll (1 \pm \varepsilon_a'/D)^2 \quad (4)$$

и предположим, что $\varepsilon_a' = 0$. Тогда в соответствии с (3) можно записать $\varepsilon_a^{\pm} = \pm\delta$.

При UCD плотность состояний подложки ρ_s расщепляется на две подзоны (рис. 2, *a*, где $\omega_{1,3} = \pm\theta V^2/D$, $\omega_{2,4} = \mp D \mp \theta V^2/D$). Щель в спектре $\Delta = \omega_1 - \omega_2 = 2\theta V^2/D$. Ширина обеих подзон ($W_{41} = \omega_4 - \omega_1$, $W_{32} = \omega_3 - \omega_2$) равна D .

Плотности состояний ρ_s^{\pm} при NCD представлены на рис. 2, *b-g*. Знак "плюс" (рис. 2, *b, e*) относится к плотности состояний ρ_s^+ поверхностных атомов подрешетки адатомов с зарядами $Z_+ = Z(1 + c)$, знак

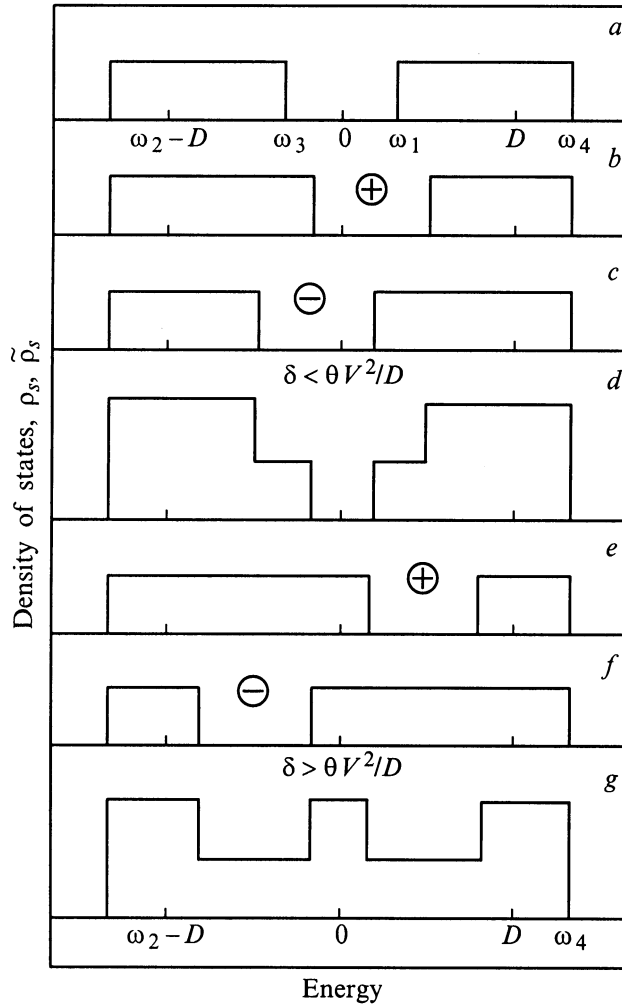


Рис. 2. Изменение плотности состояний поверхности подложки при переходе из состояния UCD (с плотностью состояний ρ_s (a)) в состояние NCD (с плотностью состояний ρ_s^+ (b,e), ρ_s^- (c,f), $\tilde{\rho}_s = \rho_s^+ + \rho_s^-$ (d,g)) в пределе $4\theta(V/D)^2 \ll 1$. Случаи b, c, d относятся к $\delta < \theta V^2/D$; e, f, g — к $\delta > \theta V^2/D$. Плотность состояний ρ_s соответствует одноатомной поверхностной ячейке, $\tilde{\rho}_s$ — двухатомной поверхностной ячейке. Обозначения (\pm) отвечают (\pm) -подрешеткам адатомов.

”минус” (рис. 2, c, f) — к ρ_s^- для подрешетки с зарядами $Z_- = Z(1 - c)$. При этом параметры ω_k переходят в ω_k^\pm , где $k = 1, \dots, 4$

$$\begin{aligned} \omega_1^\pm &= \pm\delta + \theta V^2/D, & \omega_2^\pm &= -D - \theta V^2/D, \\ \omega_3^\pm &= \pm\delta - \theta V^2/D, & \omega_4^\pm &= D + \theta V^2/D, \\ \tilde{\omega}_{41}^\pm &= |D \mp \delta|, & \tilde{\omega}_{32}^\pm &= |D \pm \delta|, & \Delta &= 2(\theta V^2/D - \delta). \end{aligned} \quad (5)$$

Из (5) следует, что щель Δ существует лишь при

$$\delta < \theta V^2/D, \quad (6)$$

что соответствует рис. 2, d, изображающему суммарную плотность состояний $\tilde{\rho}_s = \rho_s^+ + \rho_s^-$ элементарной ячейки,

состоящей в случае NCD из двух атомов. При

$$\delta \geq \theta V^2/D \quad (7)$$

щель отсутствует (рис. 2, g). Подставляя в (7) значение параметра δ из (3), получим условие схлопывания щели

$$\theta \geq \theta_C = (V^2/Dc\nu\xi Z)^2. \quad (8)$$

Здесь нужно отметить следующее обстоятельство. Как показано в работе [32], состояние NCD возникает только при определенных условиях, в частности при превышении степени покрытия θ некоторого критического значения θ_b . Таким образом, достаточным условием схлопывания щели является выполнение неравенства

$$\theta_b \leq \theta_C \leq \theta, \quad (9)$$

тогда как соотношение (8) дает лишь необходимое условие. Ясно, что схлопывание щели возможно и для более общего случая $|\varepsilon_a'| \ll D$.

Рассмотрим теперь трехмерный случай, считая $\gamma \neq 0$. Исходя из выражения (1) и заменив ε_a на ε_a^\pm , легко показать, что при $\omega \rightarrow \varepsilon_a^\pm$ плотность состояний

$$\rho_s^\pm \rightarrow \frac{2\gamma}{\pi\theta^2 V^4} (\omega - \varepsilon_a^\pm)^2, \quad (10)$$

т.е. минимумы плотности состояний ρ_s соответствуют энергиям ε_a^\pm . Максимумы ρ_s имеют место при значениях энергии

$$\begin{aligned} \Omega_{1,2}^\pm &= (\varepsilon_a^\pm \mp R^\pm)/2, \\ R^\pm &= \sqrt{(\varepsilon_a^\pm)^2 + 4\theta V^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

где нижние индексы 1, 2 соответствуют знакам \mp перед радикалом R^\pm . Таким образом, полоса разбивается на две подзоны для каждой подрешетки: верхнюю (антисвязывающую) с максимумами при $\omega = \Omega_2^\pm$ и нижнюю (связывающую) с максимумами при $\omega = \Omega_1^\pm$. Расстояние между максимумами плотностей состояний ρ_s^\pm для Z_\pm -подрешеток равно R^\pm . Таким образом, учет трехмерности просто приводит к размытию (сглаживанию) плотностей состояний $\rho_s, \rho_s^\pm, \tilde{\rho}_s$.

Достаточным условием исчезновения щелей в трехмерном спектре является перекрытие минимума плотности состояний одной подрешетки с максимумом плотности состояний другой

$$\varepsilon_a^+ = \Omega_2^-, \quad \varepsilon_a^- = \Omega_1^+. \quad (12)$$

Легко показать, что система уравнений (12) имеет решение только при условии $\varepsilon_a^+ + \varepsilon_a^- = 0$, что дает $\varepsilon_a' = 0$ и $\varepsilon_a^\pm = \pm\delta$. Подставляя значение параметра δ из (3), найдем

$$\theta_C = V\sqrt{2}/c\nu\xi Z. \quad (13)$$

Интересно отметить, что в отличие от чисто двумерного случая (см. (8)) критерий (13) не содержит параметра D , что является следствием размытия плотности состояний.

2. Переходы металл–полупроводник в системе AM/Si (001)

Применим полученные результаты к описанию экспериментальных данных по адсорбции атомов Cs и Na на поверхности (001) кремния [19]. В [19] обнаружено, что при малых покрытиях поверхность Si (001)–(2 × 1) становится металлической, т.е. имеет место переход $S \rightarrow M$. С ростом θ происходит переход $M \rightarrow S$, сопровождаемый структурной перестройкой адслоя: при адсорбции Na возникает структура (4 × 1), для Cs — (2 × 3). При дальнейшем увеличении концентрации атомов натрия поверхность Si (001) сохраняет полупроводниковые свойства, тогда как с ростом концентрации цезия вновь имеет место переход $S \rightarrow M$.

Для того чтобы применить полученные выше теоретические результаты к объяснению экспериментальных данных, необходимо оценить параметры модели для систем Na, Cs/Si (001). Как известно, для кремния величина сродства к электрону $\chi = 3.99$ eV [33]. Исходя из результатов работ [7,34], найдем положение центра π^* -полосы — $E_s \cong -4.4$ eV относительно вакуума — и примем $D = 0.17$ eV [16]. Поскольку потенциалы ионизации I цезия и натрия равны соответственно 3.89 и 5.14 eV [35], получим положение атомных уровней цезия ($\varepsilon_a^0 = 0.51$ eV) и натрия ($\varepsilon_a^0 = -0.74$ eV) относительно центра π^* -полосы. Учтем кулоновский сдвиг атомного уровня ($e^2/4l$) [36], домножив его на диэлектрическую поправку $(\varepsilon_0 - 1)/(\varepsilon_0 + 1)$ [37], где диэлектрическая постоянная кремния $\varepsilon_0 = 11.7$ [25]. Результаты расчетов из первых принципов для систем Na, K/Si (001) [20] показали, что расстояние между адатомом и центром димера Si–Si при покрытиях $\theta < 0.5$ весьма близко к значению ионных радиусов r_i натрия и калия, тогда как для больших покрытий это расстояние близко к значению их атомных радиусов r_a . Поэтому для простоты примем величину половины плеча диполя l равной полусумме r_i и r_a , т.е. $l = (r_a + r_i)/2$, что дает $l = 2.24$ и 1.39 Å для Cs и Na соответственно [35]. Тогда получим $\varepsilon_a = 1.86$ и 1.44 eV соответственно для Cs и Na. Отсюда сразу же следует, что при покрытиях, близких к нулевым, когда взаимодействием адатомов можно пренебречь, электроны с высоколежащих уровней адатомов переходят в незаполненную π^* -полосу. Таким образом, имеет место $S \rightarrow M$ переход, действительно наблюдаемый в экспериментах [19–21]. При увеличении концентрации адатомов косвенный обмен формирует две подзоны, а диполь-дипольное взаимодействие сдвигает центры тяжести этих подзон в соответствии с выражением (3). Для дальнейших оценок необходимо знать параметр дипольного сдвига ξ и заряд адатома Z в состоянии UCD.

Структура пленок AM на поверхности Si (001) сложна: предполагается, что при малых покрытиях $\theta \leq 0.5$ адатомы, находящиеся в позициях T3, выстраиваются в цепочки, тогда как при $\theta > 0.5$ начинают заполняться позиции NH (рис. 1). Для расчета параметра ξ , определяемого выражением (3), примем $A_0 = 9$,

что соответствует квадратной решетке [38]. Используя значение постоянной решетки кремния из [39], найдем $N_{ML} = 6.78 \cdot 10^{14}$ cm⁻². Тогда, воспользовавшись (3), получим для Cs и Na значения $\xi = 22.97$ и 8.85 eV соответственно. Параметр ν , необходимый для оценок расщепления полосы в состоянии NCD (см. (3)), может быть найден прямым расчетом: $\nu = 0.5$.

Для того чтобы определить величину заряда адатомов Z и положение их квазиуровней ε'_a , воспользуемся данными по изменению работы выхода $\Delta\phi$ поверхности Si (001) при адсорбции Cs и Na [16,19,40]. Как известно (см., например, [41,42]), $\Delta\phi$ можно рассчитать по формуле

$$\Delta\phi = -\theta Z\Phi, \quad \Phi = 4\pi e^2 l N_{ML}, \quad (14)$$

что дает $\Phi = 27.48$ и 17.06 eV для цезия и натрия соответственно. К сожалению, в большинстве современных публикаций (исключение — работа [16]), данные по $\Delta\phi$ приводятся в функции не от степени покрытия θ , а от времени (или дозы) напыления адсорбционной пленки. Это, естественно, снижает точность оценок заряда Z по формуле (14). Воспользовавшись результатами [16,19] и полагая, что при $\theta = 0.1$ понижение работы выхода $\Delta\phi \sim -2$ eV для Cs и -1 eV для Na, получим соответственно $Z \approx 0.7$ и 0.59 . При этом $\varepsilon'_a(\text{Cs}) \approx 1.3$ eV, $\varepsilon'_a(\text{Na}) \approx 1.2$ eV. Принимая $\Delta\phi \sim -3$ и -2 eV для цезия и натрия при $\theta = 0.25$, получим соответственно $Z \approx 0.4$ и 0.5 . Тогда $\varepsilon'_a(\text{Cs}) \approx 0.6$ eV, $\varepsilon'_a(\text{Na}) \approx 0.9$ eV. Таким образом, при промежуточных покрытиях квазиуровни натрия и цезия по-прежнему лежат гораздо выше центра полосы. Следовательно, в соответствии с выражением (13) переход в бесщелевое состояние невозможен (это же легко показать и для двумерного случая). Таким образом, обретя щель в спектре вследствие косвенного обмена, системы Na/Si (001) и Cs/Si (001) сохраняют при промежуточных покрытиях полупроводниковое состояние. Очень грубо можно оценить величину щели Δ как разность между максимумами плотности состояний ρ_s , т.е. R (см. (11)), что дает, естественно, завышенное значение Δ . Принимая $V = D$, получим $R \approx 0.6$ и 1.0 eV для цезия и натрия соответственно ($\theta = 0.5$). Величина щели, наблюдаемой на эксперименте, равна 0.2 eV для Cs и 0.6 eV для Na [19]. Учитывая, что $\Delta < R$, результат следует признать удовлетворительным.

Рассмотрим теперь $\theta \sim 0.5$. Принимая $\Delta\phi \sim -3$ и -2 eV, найдем $Z \approx 0.2$ для Cs и Na и соответственно $\varepsilon'_a(\text{Cs}) \approx 0$, $\varepsilon'_a(\text{Na}) \approx 0.68$ eV. Отметим, что квазиуровень цезия ε'_a , лежавший при нулевых покрытиях выше квазиуровня натрия, при больших покрытиях оказывается ниже его. Это является следствием большего значения параметра диполь-дипольного сдвига ξ для Cs, чем для Na. Поскольку квазиуровень натрия по-прежнему находится значительно выше центра π^* -полосы, щель в спектре Na/Si (001) сохраняется. При этом $\Delta < R \approx 1$ eV. С другой стороны, квазиуровень цезия теперь перекрывается с центром π^* -полосы, т.е. удовлетворяет критерию (13). Следовательно, если в системе Cs/Si (001) при больших покрытиях возможен переход UCD \rightarrow NCD, то он будет сопровождаться переходом $S \rightarrow M$.

Для определения возможности перехода $UCD \rightarrow NCD$ необходимо показать, что имеет место состояние, в котором параметр порядка c , определяющий различие зарядов адатомов в (\pm) -подрешетках, не равен нулю (можно показать, что если NCD состояние возможно, то оно выгодно [32]). Воспользовавшись выражением для плотности состояний на адатоме ρ_s при $\theta = 1$ из [29] (с соответствующей заменой ε_a на ε_a^\pm), получим плотности состояний адатомов в подрешетках ρ_a^\pm

$$\rho_a^\pm(\omega) = [V^2/\pi D(\omega - \varepsilon_a^\pm)^2]F(\omega), \quad (15)$$

где F определяется выражением (1). При заполнении только нижних (\pm) -подзон получим (в пределе $\gamma \rightarrow 0$)

$$n_a^\pm = \frac{V^2}{\pi D} \frac{\varepsilon_F - \omega_2^\pm}{(\varepsilon_F - \varepsilon_a^\pm)(\omega_2^\pm - \varepsilon_a^\pm)}, \quad (16)$$

где ε_F — энергия уровня Ферми. Поскольку π^* -полоса первоначально не заполнена, положение уровня Ферми нужно искать самосогласованным образом, исходя из сохранения числа электронов в системе, что может быть записано в виде

$$n_s + n_a = 1, \quad n_{s,a} = (n_{s,a}^+ + n_{s,a}^-)/2, \quad (17)$$

где $n_{s(a)}$ — среднее число заполнения поверхностной зоны (адатома) в расчете на один поверхностный атом. С другой стороны, исходя из вида плотности состояний двумерного субстрата (рис. 2), легко показать, что

$$n_s = (\varepsilon_F - \omega_2^+)/\tilde{W}_{32}^+ + (\varepsilon_F - \omega_2^-)/\tilde{W}_{32}^-. \quad (18)$$

Находя ε_F из (17), (18) и подставляя его значение в (16), получим самосогласованные уравнения для определения чисел заполнения адатомов. Параметр зарядового упорядочения $c \neq 0$ определяется из уравнения

$$2cZ = (V^2/\pi D)[(\varepsilon_F - \omega_2^-)/(\varepsilon_F - \varepsilon_a^-)(\omega_2^- - \varepsilon_a^-) - (\varepsilon_F - \omega_2^+)/(\varepsilon_F - \varepsilon_a^+)(\omega_2^+ - \varepsilon_a^+)]. \quad (19)$$

Поскольку $n_a = 0.77$, $n_s = 0.23$, $\varepsilon_a^\pm = \pm\delta$, получим, полагая $V = D$, $\delta = 0.30$ ($c = 0.32$), что соответствует выполнению неравенства (7). Следовательно, переход $UCD \rightarrow NCD$ имеет место и ведет в двумерном случае к схлопыванию щели в π^* -полосе. В трехмерном случае в соответствии с (13) получаем $\theta_c \approx 0.4$, что хорошо согласуется с исходным предположением $\theta \sim 0.5$. Это означает, что при больших покрытиях в адсорбированной системе $Cs/Si(001)$ осуществляются переходы $UCD \rightarrow NCD$ и $S \rightarrow M$, что и наблюдается в эксперименте [19–21].

Сделанные (довольно грубые) оценки показывают, что в принципе переходы металл–полупроводник в системах $Na, Cs/Si(001)$ могут быть объяснены не внутриатомным кулоновским отталкиванием U электронов на адатоме (модель Хаббарда), а косвенным и дипольным взаимодействиями атомов в адсорбированном слое. С другой стороны, довольно большое число физически ”прозрачных”, но трудноопределимых параметров, входящих в нашу модель, не позволяет однозначно утверждать, что именно данный механизм взаимодействия между адато-

мами ответствен за наблюдаемые переходы. Требуются дополнительные исследования, как экспериментальные, так и теоретические.

Список литературы

- [1] D. Haneman. Rep. Prog. Phys. **50**, 8, 1045 (1987).
- [2] F.J. Himpsel. Surf. Sci. Rep. **12**, 1, 1 (1990).
- [3] S. Pick. Surf. Sci. Rep. **12**, 3, 99 (1990).
- [4] Theoretical Approaches to Metal–Semiconductor Interfaces / Ed. by A. Hiraki. Ohmsha Ltd., Tokio (1995).
- [5] G.P. Srivastava. Rep. Prog. Phys. **60**, 5, 561 (1997).
- [6] H. Hamamatsu, H.W. Yeom, T. Yokoyama, T. Kayama, T. Ohta. Phys. Rev. **B57**, 11 883 (1998).
- [7] K. Kobayashi, Y. Morikawa, K. Terakura, S. Blügel. Phys. Rev. **B45**, 3469 (1992).
- [8] T. Abukawa, S. Kono. Phys. Rev. **B37**, 9097 (1988).
- [9] C.Y. Kim, K.S. Shin, K.D. Lee, J.W. Chung. Surf. Sci. **324**, 8 (1995).
- [10] K.D. Lee, C.Y. Kim, J.W. Chung. Surf. Sci. **366**, L709 (1995).
- [11] Y.-J. Ko, K.J. Chang, J.-Y. Yi. Phys. Rev. **B51**, 4329 (1995).
- [12] Y.-C. Chao, L.S.O. Johansson, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. **B56**, 15 446 (1997).
- [13] H. Ishida. Phys. Rev. **B38**, 8006 (1988).
- [14] H. Ishida, K. Terakura. Phys. Rev. **B40**, 11 519 (1989).
- [15] S. Ciraci, I.P. Batra. Phys. Rev. Lett. **56**, 877 (1986).
- [16] T. Kato, K. Ohtomi, M. Nakayama. Surf. Sci. **209**, 131 (1989).
- [17] I.P. Batra. Phys. Rev. **B43**, 12 322 (1991).
- [18] R.W. Gurney. Phys. Rev. **47**, 479 (1935).
- [19] K.D. Lee, J.W. Chung. Phys. Rev. **B55**, 19, 12 906 (1997).
- [20] Y.-C. Chao, L.S.O. Johansson, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. **B54**, 5901 (1996).
- [21] Y.-C. Chao, L.S.O. Johansson, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. **B55**, 7198 (1997).
- [22] K.D. Lee, J.W. Chung. Phys. Rev. **B57**, 4, R2053 (1997).
- [23] N.J. DiNardo, T.M. Wong, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **65**, 17, 2177 (1990).
- [24] O. Pankratov, M. Scheffler. Phys. Rev. Lett. **70**, 3, 351 (1993).
- [25] O. Pankratov, M. Scheffler. Phys. Rev. Lett. **71**, 17, 2797 (1993).
- [26] V.Yu. Aristov, L. Douillard, O. Fauchoux, P. Soukiassian. Phys. Rev. Lett. **79**, 19, 3700 (1997).
- [27] J.E. Northrup, J. Neugebauer. Phys. Rev. **B57**, 8, R4230 (1998).
- [28] O.M. Браун, В.К. Медведев. УФН **157**, 4, 631 (1989).
- [29] С.Ю. Давыдов. ФММ **47**, 3, 481 (1979).
- [30] С.Ю. Давыдов. Поверхность **8**, 17 (1991).
- [31] M. Tsukada. J. Phys. Soc. (Japan) **41**, 3, 899 (1976).
- [32] С.Ю. Давыдов. ФТТ **41**, 9, 1543 (1999).
- [33] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлейн. Поверхность и границы раздела полупроводников. Мир, М. (1990).
- [34] P. Krüger, J. Pollmann. Phys. Rev. Lett. **74**, 7, 1155 (1995).
- [35] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991).
- [36] J.W. Gadzuk. Phys. Rev. **B1**, 5, 2110 (1970).
- [37] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982).
- [38] С.Е. Carrol, J.W. May. Surf. Sci. **29**, 1, 60 (1972).
- [39] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука, М. (1976).
- [40] M. Tikhov, G. Boishin, L. Surnev. Surf. Sci. **241**, 1, 103 (1991).
- [41] S.Y. Davydov. Appl. Surf. Sci. **140**, 1, 52 (1999).
- [42] S.Y. Davydov. Appl. Surf. Sci. **140**, 1, 58 (1999).