

## W(100) c(2×2)表面的STM图像

陈文斌 陶向明 尚学府 谭明秋

浙江大学物理系, 杭州 310027

摘要:

用基于第一性原理的密度泛函理论研究了W(100) c(2×2)再构表面的表面弛豫以及扫描隧道显微镜(STM)图像和衬底偏压的关系. 计算所得到的表面原子沿[-110]方向的畸变位移 $\delta$ 为0.027 nm, 畸变能 $\Delta E$ 为80.6 meV·atom<sup>-1</sup>, 表面原子的弛豫分别为-7.6% ( $\Delta d_{12}/d_0$ )和+0.8% ( $\Delta d_{23}/d_0$ ), 功函数 $\Phi$ 为4.55 eV. STM图像模拟表明, 由于表面原子沿[-110]方向的位移, 会导致出现平行于[110]方向的亮暗带状条纹. STM图像中突起所对应的并不是表面或次表面的钨原子, 而是zig-zag型W原子链中线位置; 而STM暗区对应于原子位置畸变形成的相邻zig-zag型W原子链中间区域. 当衬底负偏压时, STM针尖典型起伏高度大约在0.008-0.013 nm之间; 而当衬底正偏压时, 针尖起伏高度在0.019-0.024 nm之间变化.

关键词: W(100) c(2×2)表面 Zig-zag畸变 STM图像

收稿日期 2008-06-10 修回日期 2008-08-19 网络版发布日期 2008-10-22

通讯作者: 陶向明 Email: taoxmm@tom.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(848KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ W(100) c(2×2)表面

▶ Zig-zag畸变

▶ STM图像

本文作者相关文章

▶ 陈文斌

▶ 陶向明

▶ 尚学府

▶ 谭明秋