

H吸附诱发ZnO(10-10)表面的金属化

刘亚明 戴宪起 姚树文 侯振雨

河南科技学院机电学院, 河南 新乡 453003; 河南师范大学物理与信息工程学院, 河南 新乡 453003; 河南科技学院化学化工学院, 河南 新乡 453003

摘要:

采用基于广义梯度近似的投影缀加平面波赝势和周期性边界条件的超晶胞模型, 用第一原理方法计算并分析了H在ZnO(10-10)面上的吸附能、态密度和能带结构. 结果表明: 1) H单原子吸附时, H在ZnO(10-10)面上的吸附(用ZnO(10-10)-H表示)只形成OH原子团, 没有ZnH出现; 面上剩余的Zn悬挂键导致此面显示出很强的金属性. DOS和能带分析显示导带(CB)底的Zn 4s态得到电子, 向下移动导致价带导带在禁带中出现交叠, 呈现明显金属化. 2) 双H在ZnO(10-10)面上的吸附用ZnO(10-10)-2H表示, 在ZnO(10-10)-2H吸附面上, 2H分别吸附在O、Zn上, 饱和了面上的两个悬挂键, DOS和能带分析显示ZnO(10-10)-2H吸附面与清洁ZnO(10-10)面大致相同, 均为绝缘面.

关键词: 第一原理 金属化 ZnO H吸附

收稿日期 2008-07-02 修回日期 2008-08-15 网络版发布日期 2008-10-06

通讯作者: 戴宪起 Email: xqdai@henannu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 周震; 言天英; 高学平. 储能材料的模拟与设计[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1168-1174
2. 冯晶; 陈敬超; 肖冰; 杜晔平; 王生浩; 张利娟. Ag-Sn合金的氧化过程与热力学性质[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 2007-2012

扩展功能

本文信息

PDF(358KB)

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

▶ 第一原理

▶ 金属化

▶ ZnO

▶ H吸附

本文作者相关文章

▶ 刘亚明

▶ 戴宪起

▶ 姚树文

▶ 侯振雨