

S钝化GaAs(100)表面的电子特性

马丽, 危书义, 汪建广

河南师范大学物理与信息工程学院 河南新乡

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

用TB LMTO方法研究单层的S原子在理想的GaAs(1 0 0)表面的化学吸附,对GaAs(1 0 0)表面是Ga 和As 中断两种情况分别进行考虑.计算了S原子在不同位置的吸附能、吸附体系与清洁的GaAs(1 0 0)表面的层投影态密度,以及电子转移情况.结果表明,两种情况下S原子都是桥位吸附最稳定,S Ga相互作用比S As稍强,S钝化GaAs(1 0 0)表面可以取得明显的钝化效果.

The adsorption of one monolayer S atoms on an ideal GaAs(10 0) surface is studied by using the self-consistent tight-binding linear muffin-tin orbital method. The S atoms chemisorption on Ga-terminated and As-terminated surface are considered respectively. Adsorption energies of a S atom on different sites are calculated. The layer projected density of states for S atoms covered GaAs(100) surface is studied and compared with that of the clean surface. The charge transfer is investigated. It is...

关键词 [化学吸附](#) [钝化](#) [超级原胞](#) [相互作用](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 马丽; 危书义; 汪建广

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1049KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

- ▶ [本刊中包含“化学吸附”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [马丽](#)
- [危书义](#)
- [汪建广](#)