

用低能电子衍射计算Ni(001)表面化学吸附氧族元素的表面原子层间距

蓝田,徐飞岳

成都电讯工程学院微电子技术 with 电子材料系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用一维能带理论计算了Ni(001)表面化学吸附氧族元素(O、S、Se和Te)的表面原子层间距 d_X (X表示O、S、Se和Te). 当表面原子层间距 $d_O=0.87\pm 0.005$ 埃, $d_S=1.29\pm 0.01$ 埃, $d_{Se}=1.44\pm 0.01$ 埃和 $d_{Te}=1.93\pm 0.01$ 埃时, LEED谱计算值与实验结果一致.

关键词 [镍](#) [化学吸附](#) [表面化学](#) [电子衍射](#) [原子间距](#) [V I A族元素](#)

分类号 [0647](#) [0641](#)

The calculation of surface atomic layer distances of chemisorption chalcogen on Ni(001) surface by low-energy-electron diffraction

LAN TIAN, XU FEIYUE

Abstract The surface atomic layer distances d_X ($X = O, S, Se, Te$) of chemisorbed chalcogens on Ni(001) surface was calculated by using one-dimensional band theory. The calculated LEED spectra are in very good agreement with the experimental results, when the surface atomic layer distances $d_O = 0.875 \pm 0.005$, $d_S = 1.29 \pm 0.01$, $d_{Se} = 1.44 \pm 0.01$, and $d_{Te} = 1.93 \pm 0.01$.

Key words [NICKEL](#) [CHEMICAL ADSORPTION](#) [SURFACE CHEMISTRY](#) [ELECTRON DIFFRACTION](#) [INTERATOMIC DISTANCE](#) [GROUP ELEMENT VIA](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(552KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“镍”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [蓝田](#)
- [徐飞岳](#)