

引用信息: CHEN Xin; CHEN Wen-Bin; SHANG Xue-Fu; TAO Xiang-Ming; DAI Jian-Hui; TAN Ming-Qiu. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(06): 861-866 [陈鑫; 陈文斌; 尚学府; 陶向明; 戴建辉; 谭明秋. 物理化学学报, 2007, 23(06): 861-866]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

氢原子在Ru(0001)表面的化学吸附

陈鑫; 陈文斌; 尚学府; 陶向明; 戴建辉; 谭明秋

浙江大学物理系, 杭州 310027

摘要:

用密度泛函理论研究了氢原子的污染对于Ru(0001)表面结构的影响. 通过PAW(projector-augmented wave)总能计算研究了 $p(1 \times 1)$ 、 $p(1 \times 2)$ 、 $(3^{1/2} \times 3^{1/2})R30^\circ$ 和 $p(2 \times 2)$ 等几种氢原子覆盖度下的吸附结构, 以及在上述结构下Ru(0001)面fcc(面心立方)格点和hcp(六方密堆)格点的氢原子吸附. 所得结果表明, 在 $p(1 \times 1)$ -H、 $p(1 \times 2)$ -H、 $(3^{1/2} \times 3^{1/2})R30^\circ$ -H和 $p(2 \times 2)$ -H几种H原子覆盖度下, 以 $p(1 \times 1)$ -H结构单个氢原子吸附能为最大. 在 $p(1 \times 1)$ -H吸附结构下, 由于氢原子吸附导致的Ru(0001)表面第一层Ru原子收缩的理论计算数值分别为-1.11%(hcp吸附)和-1.55%(fcc吸附), 因此实际上最有可能的情况是两种吸附方式都有一定的几率. 而实验中观察到的“清洁”Ru(0001)表面实际上是有少量氢原子污染的表面. 不同覆盖度和氢分压下氢原子吸附的污染对Ru(0001)表面结构有极大的影响, 其表面的各种特性都会随覆盖度的不同而产生相应的变化.

关键词: Ru(0001)表面 氢原子吸附 表面污染

收稿日期 2006-11-29 修回日期 2007-01-27 网络版发布日期 2007-04-26

通讯作者: 谭明秋 Email: mqtan@zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(457KB)

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

▶ Ru(0001)表面

▶ 氢原子吸附

▶ 表面污染

本文作者相关文章

▶ 陈鑫

▶ 陈文斌

▶ 尚学府

▶ 陶向明

▶ 戴建辉

▶ 谭明秋