

金刚石附氢(100)面脱氢势垒的量子化学研究

荣垂庆, 李延欣, 宋庆峰

吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130023|空军长春飞行学院物理教研室, 长春 130022

摘要:

采用MNDO(UHF)方法计算了金刚石(100)-(1×1):2H双氢化表面和(100)-(2×1):H单氢化表面的脱氢势垒,论证了决定金刚石附氢表面脱氢势垒大小的主要因素是气相一表面吸附氢原子间的相互排斥大小,得出(100)面两种表面结构脱氢势垒的理论预言值分别为71和59kJ·mol⁻¹,面脱氢势垒的理论预言值42kJ·mol⁻¹.揭示了在同等生长条件下金刚石(111)面可供成核和生长的反应基多于(100)面,与实验上得到的同等生长条件下(111)面的相对生长率大于(100)面的结论是一致的。

关键词: 金刚石薄膜 脱氢势垒 分子轨道方法 金刚石(100)面

收稿日期 1995-03-17 修回日期 1995-05-23 网络版发布日期 1996-01-15

通讯作者: 李延欣 Email:

本刊中的类似文章

1. 戴振文; 刘波; 潘守甫. 金刚石(111)面上乙炔生长金刚石薄膜的机理[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 904-907
2. 邵国泉; 方维海; 陈光巨; 刘若庄. 丙烯醛及其衍生物基态脱羧反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(09): 830-835
3. 高成耀; 常明. Ta/BDD薄膜电极电化学催化氧化硝基酚[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 1988-1994
4. 张慰萍; 陈克; 方容川; 胡克良. 制备类金刚石薄膜过程中的等离子体发射光谱[J]. 物理化学学报, 1992, 8(03): 383-388
5. 屈少华, 贾丽慧. 以Au和Au-Cu为衬底的Si/DLC薄膜的机械性能[J]. 物理化学学报, 2009, 25(11): 2391-2394