



# 硅表面金属原子及氧 分子吸附的第一性原 理研究

汇报人：

2024-01-19

# 目录

- 引言
- 理论基础与计算方法
- 硅表面金属原子吸附研究
- 硅表面氧分子吸附研究
- 金属原子与氧分子共吸附研究
- 总结与展望



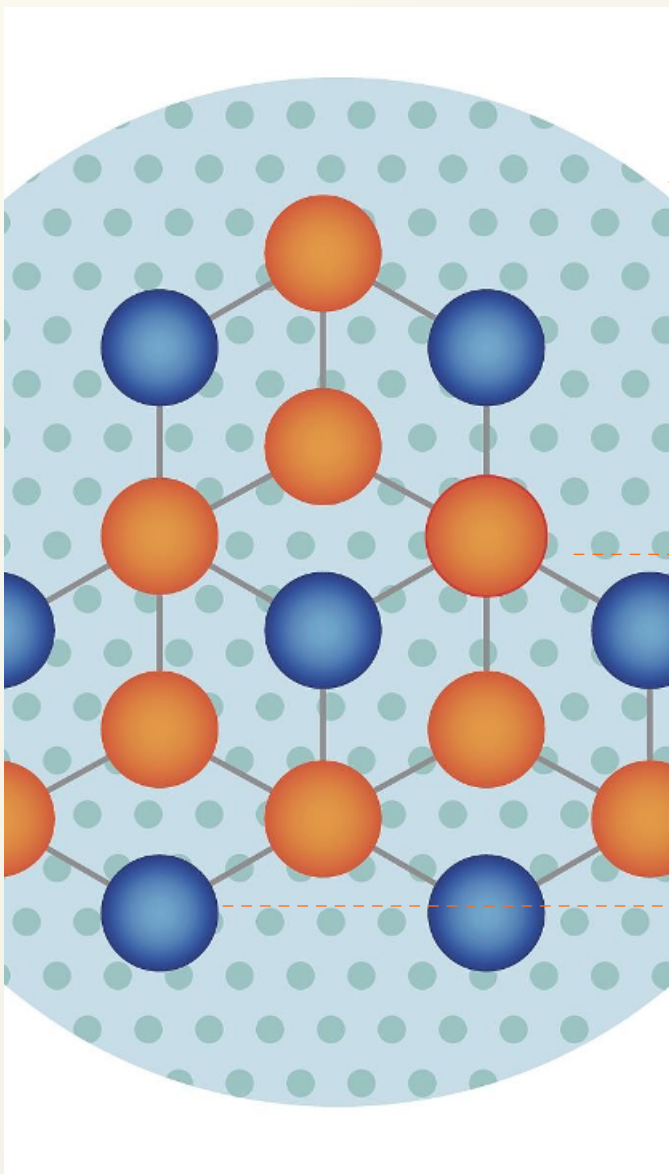
01

# 引言





# 研究背景与意义



01

## 硅基材料在电子器件、光电器件等领域的应用

硅基材料是现代电子和光电器件的基础，对其表面性质的研究对于优化器件性能具有重要意义。

02

## 金属原子和氧分子在硅表面吸附的重要性

金属原子和氧分子在硅表面的吸附会显著改变硅表面的电子结构和化学性质，进而影响硅基器件的性能和稳定性。

03

## 第一性原理计算在表面科学中的应用

第一性原理计算能够精确模拟和预测材料表面的原子结构和电子性质，为理解表面现象和设计新材料提供有力工具。



# 国内外研究现状及发展趋势



## 国内外研究现状

目前，国内外学者已经利用第一性原理计算对硅表面金属原子和氧分子的吸附进行了广泛研究，取得了一系列重要成果。然而，对于某些复杂体系和吸附过程的机理仍缺乏深入理解。



## 发展趋势

随着计算机技术和第一性原理计算方法的不断发展，未来对硅表面金属原子和氧分子吸附的研究将更加深入。一方面，计算方法将更加精确和高效，能够处理更大规模和更复杂的体系；另一方面，研究将更加注重实验与计算的结合，以验证和深化理论预测。



# 研究内容、目的和方法

研究内容：本研究旨在利用第一性原理计算方法，系统研究金属原子和氧分子在硅表面的吸附行为。具体包括：建立硅表面金属原子和氧分子吸附的理论模型；计算不同吸附构型的能量、电子结构和化学键性质；分析吸附过程中的动力学行为和热力学稳定性。

研究目的：通过本研究，期望深入理解金属原子和氧分子在硅表面的吸附机理，揭示吸附对硅表面性质的影响规律，为优化硅基器件性能和稳定性提供理论指导。

研究方法：本研究将采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，利用高性能计算机进行大规模并行计算。具体步骤包括：构建硅表面模型并对其进行结构优化；将金属原子和氧分子放置在硅表面不同位置，计算各种吸附构型的能量和电子结构；利用分子动力学模拟方法，研究吸附过程中的动力学行为；结合热力学分析方法，评估吸附构型的稳定性。



02

## 理论基础与计算方法



# 第一性原理计算方法

1

## 基于量子力学原理

第一性原理计算方法是基于量子力学原理的计算方法，通过求解体系的薛定谔方程，得到体系的电子结构和能量等性质。

2

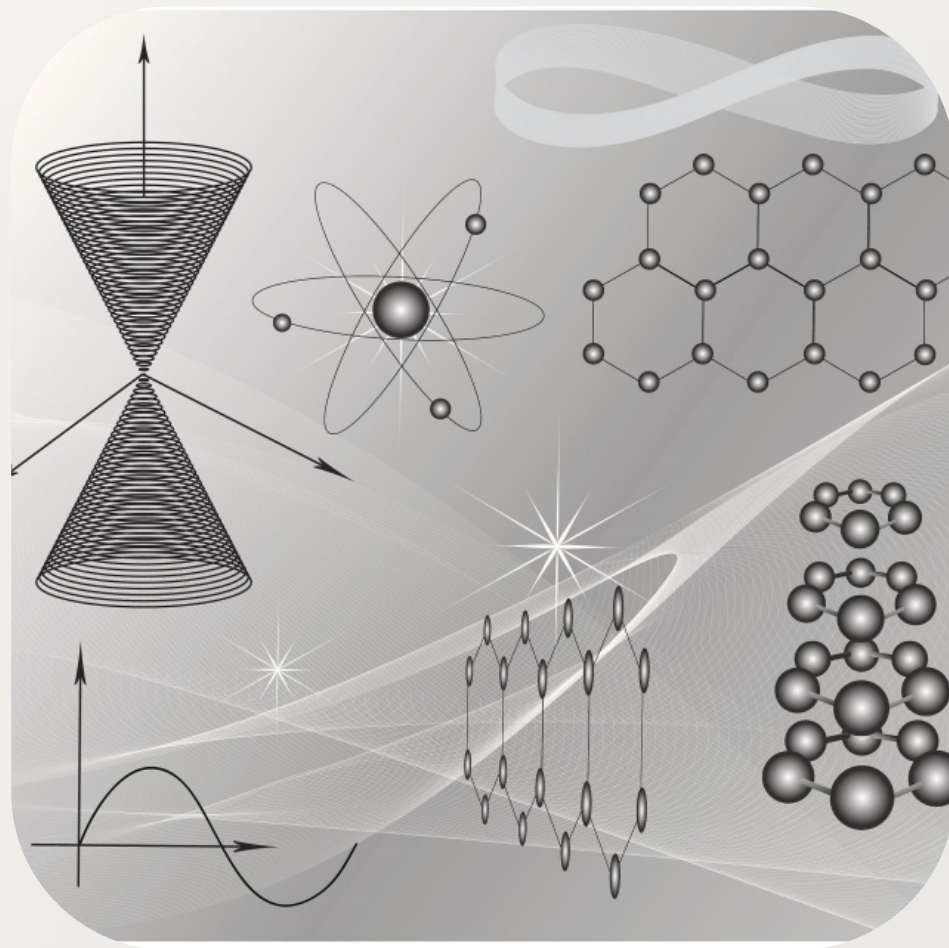
## 无经验参数

该方法不依赖于任何经验参数，只需要知道构成物质的原子的种类和位置，以及一些基本的物理常数，就可以进行计算。

3

## 高精度预测

由于该方法基于量子力学原理，因此可以得到高精度的预测结果，对于新材料的设计和性质预测具有重要意义。







# 密度泛函理论



## 电子密度分布函数

密度泛函理论是一种研究多电子体系电子结构的量子力学方法，它用电子密度分布函数来描述体系的性质，而不是使用波函数。

## Hohenberg-Kohn定理

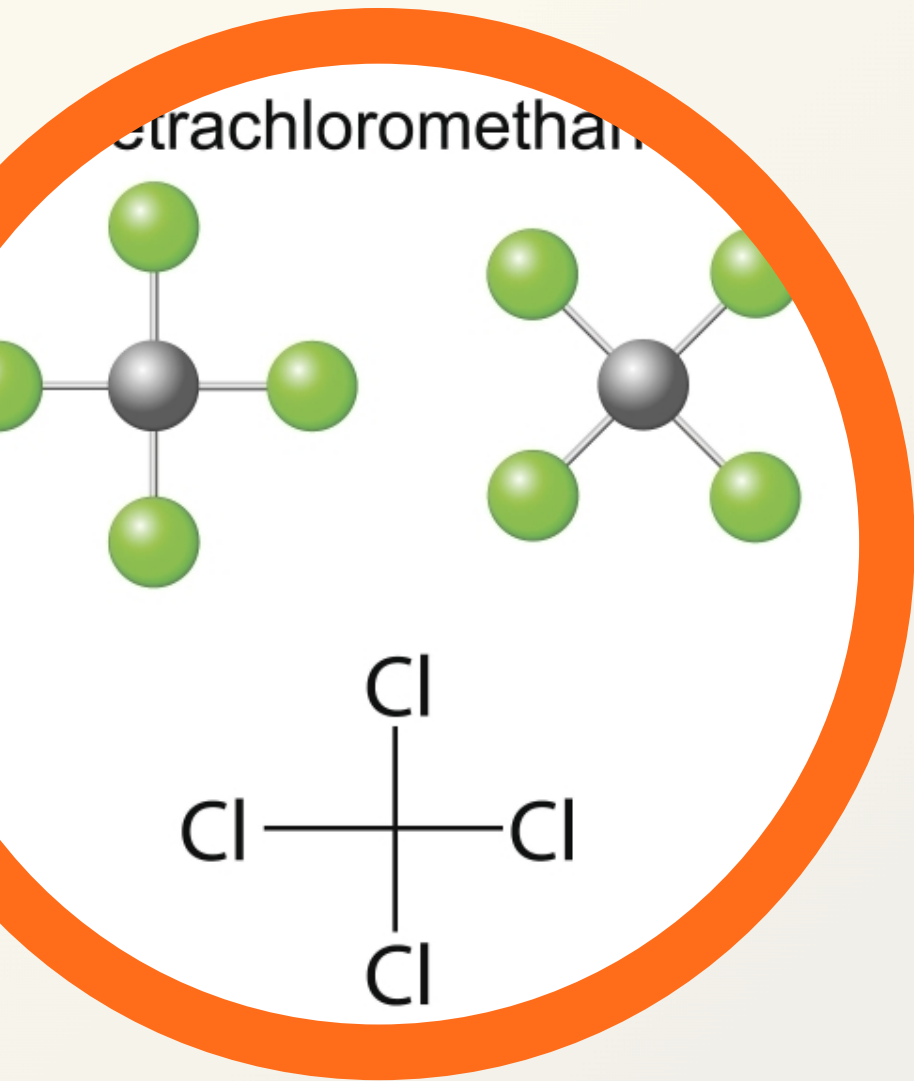
该定理证明了体系的基态能量和其他性质都是电子密度分布函数的唯一泛函，为密度泛函理论提供了坚实的理论基础。



## Kohn-Sham方程

该方程是密度泛函理论中的核心方程，通过自洽求解可以得到体系的电子密度分布和能量等性质。

# 赝势方法



01

## 有效势场

赝势方法是一种用于简化第一性原理计算的方法，它通过引入一个有效势场来近似描述原子核对电子的作用。

02

## 减少计算量

由于有效势场的引入，可以大大减少计算量，使得第一性原理计算变得更加高效。

03

## 适用于大体系

赝势方法特别适用于大体系的计算，如固体、表面和界面等。



# 计算软件与参数设置

## 常用软件

常用的第一性原理计算软件包括 VASP、CASTEP、Quantum ESPRESSO 等。

## 参数设置

在进行第一性原理计算时，需要设置一些关键参数，如截断能、k 点网格、收敛标准等。这些参数的设置会直接影响计算结果的精度和效率。

## 并行计算

为了提高计算效率，可以采用并行计算技术，利用多个处理器或计算机同时进行计算。

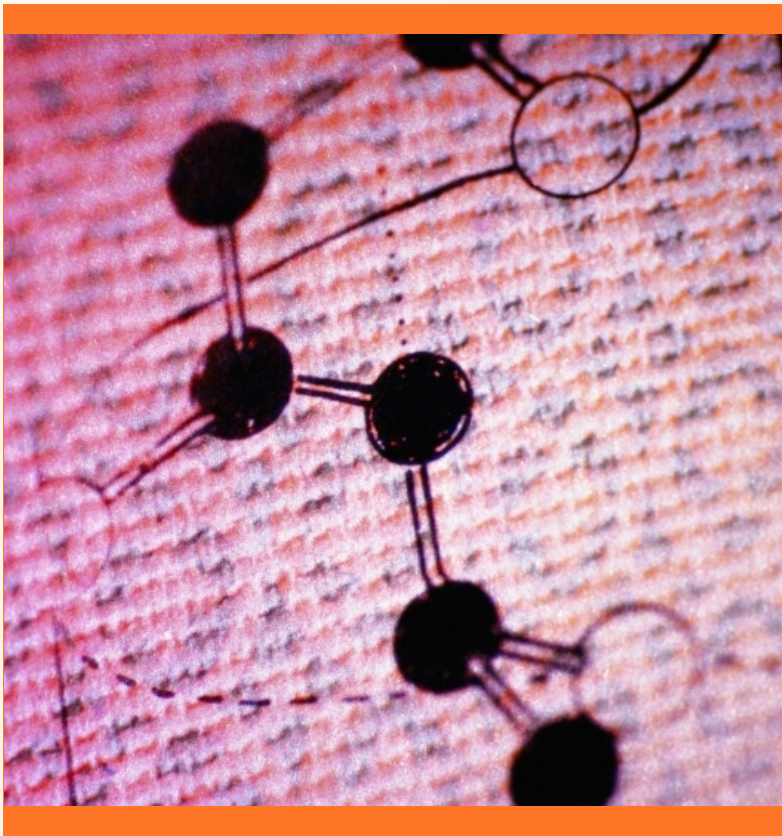


03

## 硅表面金属原子吸附研究



# 金属原子在硅表面吸附构型



## 顶位、桥位和穴位吸附

金属原子在硅表面可以形成顶位、桥位和穴位三种不同的吸附构型，其中顶位吸附构型最为稳定。



## 吸附构型的稳定性

不同金属原子在硅表面的吸附构型稳定性不同，与金属原子的种类和硅表面的结构有关。



## 吸附构型的转变

在一定条件下，金属原子可以在硅表面发生吸附构型的转变，如从顶位吸附转变为桥位或穴位吸附。

# 吸附能、电子结构和化学键合



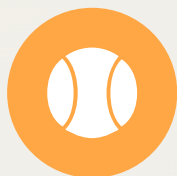
## 吸附能

金属原子在硅表面的吸附能大小与金属原子的种类和吸附构型有关，一般来说，顶位吸附构型的吸附能最大。



## 电子结构

金属原子吸附在硅表面后，会与硅原子形成化学键，同时发生电子转移，改变硅表面的电子结构。



## 化学键合

金属原子与硅原子之间的化学键合类型包括共价键、离子键和金属键等，具体类型取决于金属原子的种类和吸附构型。



# 金属原子扩散与聚集行为

## 扩散行为

在硅表面，金属原子可以发生扩散行为，扩散速率与温度、金属原子的种类和硅表面的结构有关。

## 聚集行为

在一定条件下，金属原子可以在硅表面发生聚集行为，形成金属团簇或纳米颗粒。

## 扩散与聚集的影响因素

金属原子的扩散和聚集行为受到多种因素的影响，如温度、压力、硅表面结构和金属原子的浓度等。



以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/128133030015006075>