材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.20250928002

温度对EBCMOS钝化层表面残气吸附特性的影响

岳纪鹏，梁荣轩，刘原赫，陈卫军*，宋　德*，李　野
（长春理工大学 物理学院，长春 130022）

摘　要： 基于密度泛函理论并结合蒙特卡洛方法，建立了电子轰击CMOS（EBCMOS）钝化层（Al_2O_3和SiO_2）表面残气分子的吸附构型，深入研究不同温度下残气分子在两种钝化层材料（001）表面的吸附特性。结果表明，温度升高对两种钝化层材料（001）晶面的残气分子吸附有较好的抑制作用。在Al_2O_3（001）表面，H_2O吸附热最大，H_2的吸附热最小；在SiO_2（001）表面，H_2O吸附热最大，CO_2的吸附热最小。此外，当温度升高超过300℃时，所有残气分子的脱附时间均可降到0.1 s以下，对比发现，残气在SiO_2（001）脱附时间普遍较短，更适合作为温变下的钝化层材料。该研究结果为深入理解温度对残余气体吸附与脱附特征的调控作用提供了理论依据，对提升EBCMOS器件的性能具有重要的指导意义。

关键词： EBCMOS；蒙特卡洛；密度泛函理论；气体吸附
中图分类号： O482　**文章编号：** 1001－5868(2025)06－1041－07

Influence of Temperature on Residual Gas Adsorption Characteristics on the Surface of Electron-Bombarded CMOS Passivation Layer

YUE Jipeng, LIANG Rongxuan, LIU Yuanhe, CHEN Weijun, SONG De, LI Ye
(**School of Physics, Changchun University of Science and Technology, Changchun, 130022, CHN**)

Abstract: Based on density functional theory (DFT) combined with the Monte Carlo method, the residual gas molecule adsorption configuration on the passivation layer (Al_2O_3 and SiO_2) surface of electron-bombarded complementary metal-oxide semiconductors (EBCMOS) was established, and the adsorption characteristics of residual gas molecules on the (001) surface of the two passivation layer materials at different temperatures were studied in depth. The results show that an increase in temperature has an inhibitory effect on adsorption. On the Al_2O_3(001) surface, H_2O has the largest and H_2 the smallest adsorption heat; on the SiO_2(001) surface, H_2O also has the largest, whereas CO_2 has the smallest adsorption heat. In addition, when the temperature increases above 300℃, the desorption time of all the residual gas molecules is reduced to less than 0.1 s. A comparative analysis reveals that the desorption time of residual gases on the SiO_2(001) surface is generally shorter, making it more suitable as passivation layer material under temperature variations. The research results provide a theoretical basis for an in-depth understanding of the regulatory effect of temperature on the adsorption and desorption characteristics of residual gases and have important guiding significance for improving the performance of EBCMOS devices.

Key words: EBCMOS; Monte Carlo method; density functional theory; gas adsorption

收稿日期：2025－09－28.
基金项目：国家自然科学基金项目（U2141239）；吉林省光电子探测与多为信息处理工程研究中心自主创新能力建设项目（2021C032）.
* **通信作者：**陈卫军，宋　德

0 引言

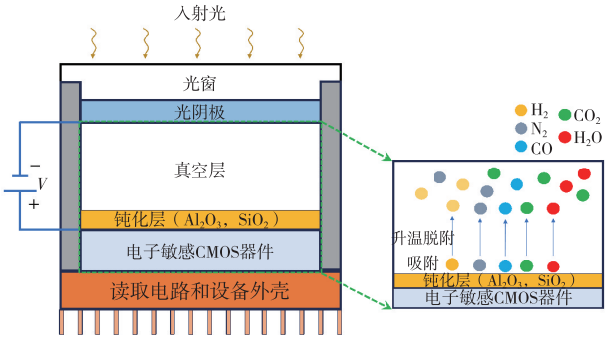
EBCMOS是一种将CMOS图像传感器作为真空器件阳极的光电器件，结构主要包括阴极、阳极和倍增极。其工作原理是将外部光子光电转换为电子后，在真空腔内加速轰击在CMOS图像传感器上，从而实现微弱信号的收集与成像。EBCMOS器件因其具有较高的稳定性、较精准快速的反应以及数字化低成本的特点，而被广泛应用于微光夜视领域[1]。近年来，EBCMOS作为拥有强大微光成像功能的新型器件，已经成为热门研究方向之一。

EBCMOS器件在制造工艺中会不可避免吸入残气分子，而且器件在自身工作过程中会发生温度变化，在温度和电子轰击影响下，气体脱附后会引起近贴空间气体浓度的提高，进而会减弱光阴极的性能甚至缩短器件的寿命。近年来，研究人员通过调整器件受热温度和进行表面钝化处理，致力于去除器件真空腔内的残气分子。李桐桐等[2]通过动态测试方法搭建了高真空除气平台，实验发现对CMOS部件进行持续72 h以上的260℃烘烤可以有效去除表面气体。徐江涛通过实验对二代微光成像器件阴极材料进行300℃保温12 h的烘烤，发现水蒸气可完全消除[3]，并且对三代微光像增强器的阴极组件分别加热到200℃和500℃进行放气谱测试时，发现有害残气消除非常缓慢，活泼气体随加热温度的升高和时间的延长迅速消除[4]。王生凯等[5]对背照式CMOS传感器进行100℃～325℃的变温热处理实验，发现对CMOS传感器的热处理温度不宜超过325℃，否则器件的信噪比会降低。氧化铝和氧化硅构成的钝化层表面对残气分子的吸附有抑制作用，本课题组的李书涵等[6]通过第一性原理计算发现Al_2O_3(001)面对腔内残气分子有较好的抑制作用。但从理论方面，温变下的残余气体吸附机制尚未研究，研究温度变化下钝化层表面的残气吸附特性，对除去残气分子进而提高器件的性能具有指导意义。

蒙特卡洛法相较于传统的数学计算方法具有许多优点，适合用于分子模拟计算[7-9]。密度泛函理论是一种常用于计算晶面吸附性质的有效方法[10-12]。本文通过蒙特卡洛模拟方法和密度泛函理论探索残气分子在EBCMOS钝化层不同材料表面的吸附规律。首先根据已有文献确定真空腔内的残气成分[2]，通过密度泛函理论，首先得到5种残余气体分子在Al_2O_3(001)和SiO_2(001)面的稳定构型和吸附能。随后，通过蒙特卡洛模拟方法探究了残气分子在两种钝化层材料(001)面上的吸附热变化规律，并选取其中最难去除的水气，对比其在两种钝化层材料各晶面上的吸附热，验证了温度变化对钝化层材料晶向选择的影响。最后，计算得到残余气体在不同温度点下的脱附时间。

1 模型与方法

EBCMOS器件的结构如图1所示。在图1(a)中，入射的微弱光经过光窗和光阴极后被转化为光电子，由于真空层负高压的存在，光电子被加速轰击到电子倍增层的钝化层表面，在半导体中激发大量二次电子，后由电子敏感CMOS器件收集并通过读取电路进行读出。在此过程中，真空层内的残余气体分子会在钝化层表面发生吸附，影响二次电子的产生，进而影响器件的增益，其示意图如图1(b)所示。因此，研究温度变化下钝化层表面残余气体的吸附及脱附规律对于优化EBCMOS器件的性能至关重要。



(a) EBCMOS器件结构 (b)真空层内部残气吸附

图1 EBCMOS器件结构与残气吸附

本研究采用Materials Studio软件进行，分为三个阶段：

第一阶段建立残气分子、2×2×1的Al_2O_3晶胞以及2×2×2的SiO_2晶胞模型并进行结构优化。经过结构优化后Al_2O_3晶胞优化的晶格常数为a=4.759Å，b=4.759Å，c=12.991Å。SiO_2晶胞优化的晶格常数分别为a=4.921Å，b=4.921Å，c=5.416Å，与实际情况一致。进行扩胞切面后，为避免相邻单元之间的相互作用对气体吸附产生的干扰，将真空层高度设置为1.5 nm，这与实际工艺中对钝化层“低缺陷密度”的要求完全匹配。得到2×2×1的Al_2O_3晶胞和2×2×2的SiO_2晶胞用来后续

吸附计算。

第二阶段使用密度泛函理论方法模拟出残气分子在 Al_2O_3(001)面和 SiO_2(001)面的吸附能参数，并获得了吸附的稳定构型。在实际工艺中通过控制沉积温度和前驱体脉冲时间，可实现 Al_2O_3 和 SiO_2 的(001)晶面的择优生长。几何结构优化采用广义梯度近似GGA中的PBE泛函以处理电子交换关联作用。由于存在弱相互作用力，本研究采用TS方法为基础的DFT-D修正方法减小计算过程中产生的误差。此外，引入DNP基组提高轨道展开精度。为提高计算准确性，布里渊区k点网格设置为3×3×1。迭代收敛的能量的最大差值、原子最大应力和原子的最大位移值分别设置为 1×10^{-4} Ha，2×10^{-2} Ha/Å 和 5×10^{-2} Å。

第三阶段首先模拟在250～600 K温度范围内，固定吸附量下的5种残气分子在 Al_2O_3(001)和 SiO_2(001)的吸附行为，从而得到吸附热变化规律。随后计算最难去除的水分子在 Al_2O_3 和 SiO_2 的各晶面下的吸附热参数，验证了残气吸附的 Al_2O_3 和 SiO_2 最弱晶向。最后计算得到温度变化下残气在 Al_2O_3(001)面和 SiO_2(001)面上脱附时间。该阶段使用蒙特卡洛方法，使用Metropolis采样方法，残气分子与表面材料的相互作用包括静电作用和范德华作用，静电作用采用Ewald加和方法，范德华作用采用Atom based方法，模拟采用COMPASS力场。

吸附热是在吸附过程中，气体分子吸附到固体表面时放出的热量，吸附热的大小是区别物理吸附和化学吸附的重要标志，是评价吸附质与吸附剂之间相互作用强度的指标之一，同时也是了解吸附过程中的热效应和解吸再生成本的重要热力学量之一[13-15]。

吸附能是在绝对零度下吸附体系总能量的变化，吸附体系中的吸附能(E_{ad})计算方式为：

$$E_{ad}=E_{system}-E_{sur}-E_{gas} \tag{1}$$

式中，E_{system} 为吸附体系的总能量，E_{gas} 为气体总能量，E_{sur} 为未吸附气体时晶面的总能量。E_{ad}，E_{system}，E_{sur} 以及 E_{gas} 的单位均为eV。若计算的 $E_{ad}<0$，则表示在气体吸附过程释放热量，表明该过程能够自发进行。E_{ad} 的绝对值越大，说明吸附过程的总能量变化越大，表示晶面与气体分子之间的作用力越强[16-17]。

气体脱附时间[18-20]是残气分子在材料表面脱附所用的时间，与环境温度和吸附能有关，脱附时间 τ 计算公式为：

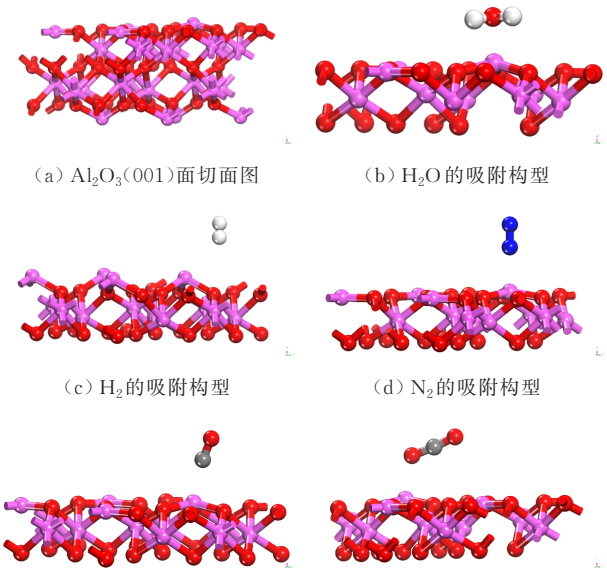
$$\tau=A^{-1}\exp\left(\frac{|E_{ad}|}{K_BT}\right) \tag{2}$$

式中，τ 为气体脱附时间，单位为s；A 为经验常量，值为 1.0×10^{12} s^{-1}；K_B 为玻尔兹曼常数；T 为环境温度，单位为开尔文温度K；E_{ad} 为材料对气体的吸附能，单位为eV。气体脱附时间 τ 是衡量各种吸附模型的吸附强度与脱附能力的重要参数，可以预测除气难度和残气脱附行为。

2　结果与讨论

2.1　残气分子吸附于 Al_2O_3(001)面与 SiO_2(001)面的吸附构型及吸附能

基于密度泛函理论模拟5种残气在 Al_2O_3 基底材料最稳定的吸附构型，如图2所示。需要说明的是，材料表面设置为水平方向，且模拟过程不涉及温度变化，为了方便观察隐去材料部分原子。可以看到，吸附过程没有新的成键，属于物理吸附。H_2O 近乎水平地吸附在 Al_2O_3(001)面，H_2O 分子里的氧原子与材料表面的铝原子距离较近；H_2 分子竖直吸附于 Al_2O_3(001)面且与氧原子距离较近；N_2 分子与 H_2 吸附模型类似，也是竖直吸附，但 N_2 分子与材料表面的铝原子距离较近；CO分子倾斜吸附在材料表面，碳原子距离材料表面的铝原子较近；CO_2 分子以较小的倾斜角度吸附于材料表面，气体分子中两个氧原子都吸附在铝原子上方，但吸附距离不同。



(a) Al_2O_3(001)面切面图　(b) H_2O 的吸附构型　(c) H_2 的吸附构型　(d) N_2 的吸附构型　(e) CO的吸附构型　(f) CO_2 的吸附构型

图2　残气分子在 Al_2O_3(001)面上的吸附构型

在计算出各体系能量后，通过公式(1)计算得到5种残气分子在Al_2O_3(001)面的吸附能如图3所示。吸附能的绝对值大小顺序为H_2O>CO>N_2>CO_2>H_2，吸附能绝对值越大，吸附越强烈，该结果与温度变化下各残气的吸附热大小规律相吻合。

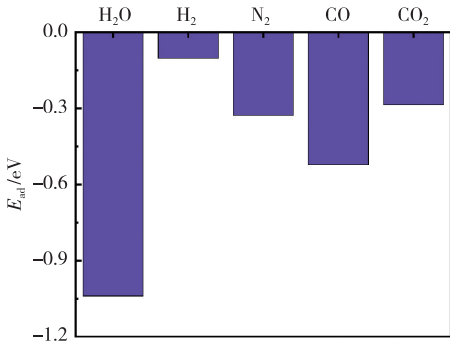


图3 残气分子在Al_2O_3(001)面上的吸附能

使用同样的方法，模拟5种残气在SiO_2基底材料最稳定的吸附构型，如图4所示。为了方便观察，隐去材料部分原子。由吸附构型可以明显看出吸附过程没有新的化学键的形成，因此判定为物理吸附。H_2O分子倾斜的吸附在SiO_2(001)面，H_2O分子的其中一个氢原子与材料表面的硅原子距离较近；H_2分子倾斜吸附于SiO_2(001)面；N_2分子近乎水平的吸附于材料表面；CO分子近似竖直的吸附在材料表面，碳原子朝下且距离材料表面的硅原子较近；CO_2分子吸附于材料表面的倾斜角度不大。

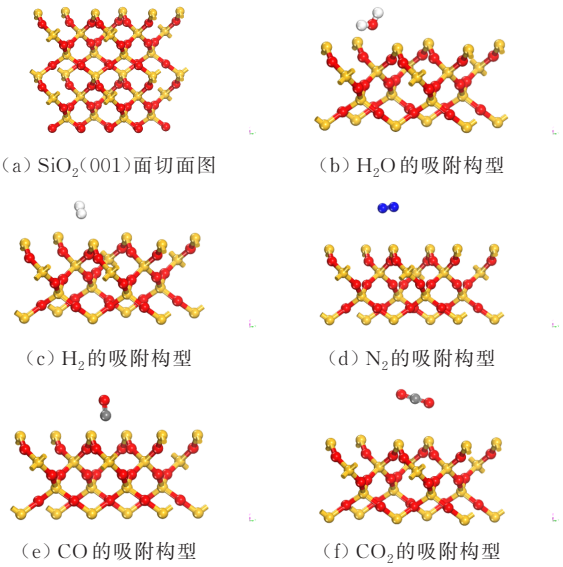


图4 残气分子在SiO_2(001)面上的吸附构型

进一步计算得到5种残气分子在SiO_2(001)面的吸附能，如图5所示，可以得出5种残气吸附强度大小顺序为：H_2O>CO>N_2>H_2>CO_2。

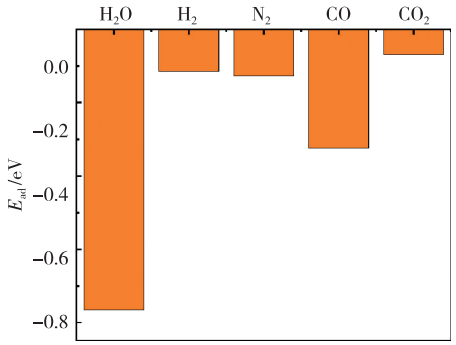


图5 残气分子在SiO_2(001)面上的吸附能

2.2 不同温度下的残余气体在Al_2O_3(001)面与SiO_2(001)面的吸附热变化

研究残气分子在温度变化下吸附于Al_2O_3(001)面的吸附热情况。如图6所示，首先，Al_2O_3(001)面对不同残余气体的吸附热都为正值，这表明所有的吸附都是放热过程，可以自发进行。但吸附热相对大小表现出明显差异性，吸附热大小顺序为：H_2O>CO>N_2>CO_2>H_2。即使在温度变化下，H_2O的吸附热都远远大于其他残气分子，其吸附强度最高，在EBCMOS钝化层表面上较难去除。相比之下，CO，N_2和CO_2的吸附热变化趋势相似，表现出中等程度的相互作用力，温度上升可以减弱其物理吸附强度，除气难度适中。虽然H_2在温度上升时吸附热有所增大，但其最弱吸附说明H_2在较高温度条件下较容易解吸。

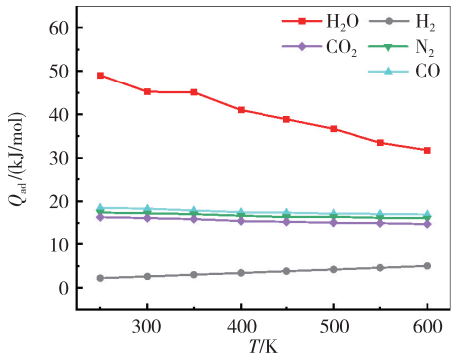


图6 残气分子在温度变化下吸附于Al_2O_3(001)面的吸附热

与Al_2O_3研究类似，在250～600 K温度变化下研究5种残气分子在SiO_2(001)面上的吸附热变化，如图7所示。首先，温变下各残气吸附热数值偏小且为正值，表明5种残气分子在SiO_2(001)面上的吸附均为可自发进行的放热过程且都是物理吸附。而且，在5种残气分子中，吸附强度最高的依然是

H_2O，CO 次之，H_2 与 N_2 吸附热相近但都高于 CO_2 在 SiO_2(001)面的吸附热。最后，在不同温度点下，各残余气体在 SiO_2(001)面上吸附热的大小顺序一致。但随着温度的升高，同种残气的吸附热降低，表明吸附强度减小，因此可以通过升温降低残气在 SiO_2(001)表面上的物理吸附强度，以达到除气的目的。

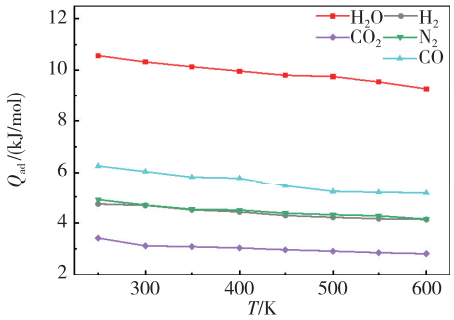


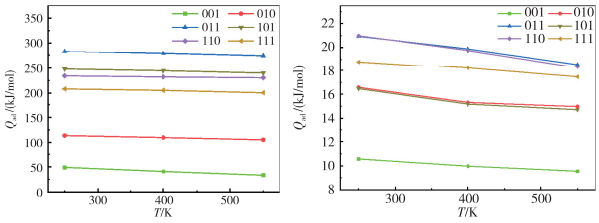
图 7　残气分子在温度变化下吸附于 SiO_2(001)面的吸附热

2.3　H_2O 在不同温度下吸附于 Al_2O_3 和 SiO_2 各晶面的吸附热对比

由 2.2 节可知，H_2O 在两种钝化层表面最难去除，进一步选取 250 K，400 K 和 550 K 三个典型温度点，对 H_2O 在 Al_2O_3 和 SiO_2 不同表面上的吸附热进行对比，旨在验证温度变化下最适合抑制残气分子吸附的两个EBCMOS钝化层材料晶向。

图 8(a)展示了 H_2O 在不同温度点下吸附于 Al_2O_3 各个晶面的吸附热变化趋势。随温度升高，各个晶面上的吸附热均表现出轻微下降的趋势。而从不同晶面之间的比较来看，吸附热的大小顺序保持稳定，大小关系为：(011)＞(101)＞(110)＞(111)＞(010)＞(001)。其中，Al_2O_3(011)晶面在不同温度下均表现出最高的吸附热，表明该表面对 H_2O 具有最强的吸附能力；而 Al_2O_3(001)晶面的吸附热始终最低，说明其表面吸附较弱。因此，Al_2O_3(001)面适合作为温变下的钝化层表面材料。

图 8(b)展示了 H_2O 在不同温度点下吸附于 SiO_2 各个晶面的吸附热变化趋势。与 Al_2O_3 类似，SiO_2 各个晶面上的吸附热均表现出随温度升高而下降的趋势。从各个晶面对比来看，相同温度下吸附热大小关系为：(011)≈(110)＞(111)＞(010)≈(101)＞(001)。其中，(011)面和(110)面的吸附热最大，约在 20 kJ/mol 上下，表明 H_2O 在这两个晶面的吸附强度较高；而 SiO_2(001)面的吸附热在不同温度下始终维持在约 10 kJ/mol，较其他晶面吸附热最低，说明 H_2O 在 SiO_2(001)面吸附强度最低。因此，可以判断 SiO_2(001)面适合作为温变下的钝化层表面材料。



(a) H_2O 吸附于 Al_2O_3 各晶面　(b) H_2O 吸附于 SiO_2 各晶面

图 8　温度变化下 H_2O 吸附于 Al_2O_3 和 SiO_2 各晶面的吸附热

2.4　不同温度下的残余气体在 Al_2O_3(001)面和 SiO_2(001)面的脱附时间

2.1 节中得到了残气分子在 Al_2O_3(001)和 SiO_2(001)面的吸附能，通过公式(2)可以计算出残气分子在不同温度下的脱附时间，结果如图 9 所示。从整体趋势来看，随着温度的升高，所有气体的脱附时间均呈现出显著缩短的趋势，说明较高温度有利于残气分子的解吸过程。这一现象符合表面热力学与动力学规律，即温度升高会增加残气分子的热运动能量，从而减弱残气分子与固体表面的相互作用，使其更易于脱附。

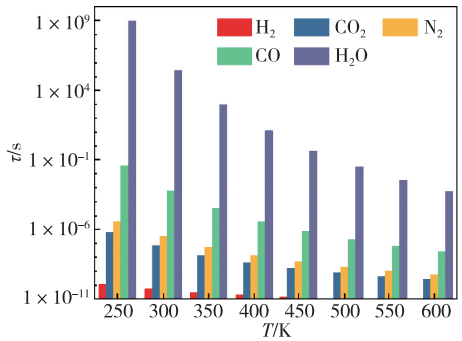


图 9　不同温度下，5 种残气分子从 Al_2O_3(001)表面上脱吸附的时间

进一步对比不同气体的脱附行为，可以发现：H_2O 的脱附时间远大于其他气体，在低温区甚至可达到 10^9 s 量级，表明其在 Al_2O_3 表面具有最强的吸附稳定性，这主要因为 H_2O 在吸附过程中吸附构型的总能量变化大，H_2O 与 Al_2O_3(001)表面相互作用力强。CO 脱附时间均处于中等水平，且随温度升高呈明显下降趋势，这说明 CO 与表面存在一定的物理吸附作用，但相较于 H_2O 相对较弱。N_2 和 CO_2 的脱附时间低于 CO 和 H_2O，说明其在 Al_2O_3(001)表面的吸附较弱，其吸附类型同样为范德华力驱动的物理吸附。H_2 的脱附时间始终保持在极低水平

（约10^{-11} s量级），表明其在表面仅发生极弱的物理吸附，几乎不稳定滞留，这意味着在实际除气或脱附过程中，H_2会最先从表面解吸。

总之，Al_2O_3(001)表面对不同气体分子的吸附稳定性差异：H_2最易解吸，CO_2，N_2和CO次之，而H_2O最为稳定。这一规律说明在EBCMOS器件除气工艺中，温度控制可实现对气体脱附顺序的调控：低温下可优先去除H_2和N_2，随着温度的进一步升高，则逐步脱附CO，CO_2，而H_2O的去除则需更高温度才能有效实现。

与残气分子在Al_2O_3脱附的研究类似，针对钝化层材料为SiO_2的情况，计算得出不同温度下的残气的脱附时间如图10所示。从整体趋势来看，随着温度升高，所有气体的脱附时间均明显缩短，这表明升温能够有效促进残气分子的解吸。

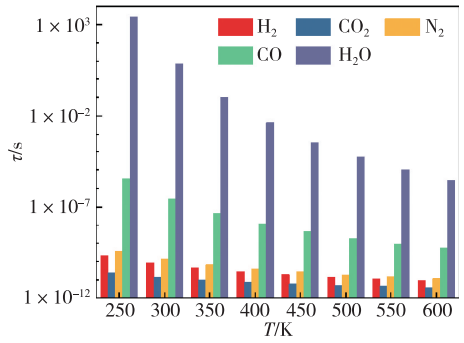


图10 不同温度下，5种残气分子从SiO_2(001)表面上脱吸附的时间

从不同气体的对比结果来看：H_2O分子在SiO_2表面的脱附时间依然显著高于其他气体，低温下（250 K）达到10^3 s的量级，说明其在表面具有最强的吸附稳定性。CO分子的脱附时间次于水分子，在1×10^{-7}～1×10^{-4} s的区间内，说明其与Al_2O_3表面有较强的相互作用。N_2与H_2的脱附时间相对较低，同样表现出典型的物理吸附特征。CO_2的脱附时间始终接近10^{-12} s量级，表明其在表面几乎无法形成稳定吸附，仅存在极弱的范德华作用，因此是最易于脱附的气体。

综上所述，SiO_2(001)表面对不同气体分子的吸附稳定性差异，CO_2最易解吸，H_2，N_2和CO次之，而H_2O最为稳定。这一规律说明在除气工艺中，温度控制可实现对气体脱附顺序的调控：低温下可优先去除CO_2，H_2以及N_2，随着温度的进一步升高，则逐步脱附CO，而水分子的去除则需更高温度才能有效实现。

3 结论

基于密度泛函理论，研究了5种残气分子在Al_2O_3(001)和SiO_2(001)面的吸附能，并确定了稳定吸附位点，验证了理想温度下各类气体吸附强度大小顺序。基于蒙特卡洛方法探讨了温度变化对EBCMOS钝化层表面残气吸附特性的影响规律，结果表明H_2O在两个表面的吸附热均为最高，其吸附会导致器件增益的衰减，因此在实际的EBCMOS器件真空腔的设计与工艺环境控制中需要特别关注水气的存在。Al_2O_3(001)面最低吸附强度气体为H_2，SiO_2(001)面最低吸附强度气体为CO_2，在温度升高的条件下所有气体的吸附强度都变弱，该结果与文献[2]的实验结论一致。进一步选取最难去除的H_2O进行钝化层材料各晶面的吸附热计算，发现两种钝化层材料的(001)面为吸附最弱晶向。最后，计算得到了残气在两种钝化层材料的(001)面的脱附时间，发现H_2O的脱附时间最长。且当温度升高超过300℃时，所有残气分子的脱附时间均可降到0.1 s以下，这对指导EBCMOS器件退火工艺的参数优化具有实际意义，尤其是在避免传统“经验式退火”导致的效率低下或器件损伤方面。通过对比残气在两种材料的脱附时间可知，SiO_2(001)面可以有效抑制温变下残气的吸附，所以在EBCMOS倍增层钝化层制备中，优先选择SiO_2作为材料，并通过实际工艺调控晶向为(001)面，可显著降低残气吸附对器件性能的影响。

参考文献：

[1] 唐家业，徐鹏霄，戴丽英，等. 混合式光电探测器[J]. 光电子技术，2015，35(2)：73-77，90.
Tang Jiaye，Xu Pengxiao，Dai Liying，et al. Review of hybrid photodetector[J]. Optoelectronic Technology，2015，35(2)：73-77，90.

[2] 李桐桐，肖 超，焦岗成，等. 电子敏感CMOS部件除气方法[J]. 应用光学，2022，43(6)：1181-1186.
Li Tongtong，Xiao Chao，Jiao Gangcheng，et al. Degassing method of electronic sensitive CMOS components[J]. Journal of Applied Optics，2022，43(6)：1181-1186.

[3] 徐江涛. 二代微光成像器件阴极材料放气成份分析[J]. 真空科学与技术，2003，23(3)：219-222.
Xu Jiangtao. Desorptions of photocathode materials used in fabrication of 2nd generation low light-level imaging devices [J]. Vacuum Science and Technology，2003，23(3)：219-222.

[4] 徐江涛. 真空残气对GaAs阴极发射性能的影响[J]. 应用光

学，2003，24(2)：13-15.
Xu Jiangtao. Effect of residual gas on emission property of gallium arsenide cathode in vacuum[J]. Journal of Applied Optics, 2003, 24(2): 13-15.

[5] 王生凯，靳　川，乔　凯，等. 热处理对背照式CMOS传感器信噪比影响的实验研究[J]. 红外技术，2019，41(6)：585-590.
Wang Shengkai, Jin Chuan, Qiao Kai, et al. Impact of annealing temperature on SNR in backside-illuminated CMOS image sensor: an experimental study[J]. Infrared Technology, 2019, 41(6): 585-590.

[6] 李书涵，陈文娥，王重霄，等. EBCMOS钝化层表面残气吸附特性[J]. 半导体光电，2023，44(6)：901-906.
Li Shuhan, Chen Wene, Wang Chongxiao, et al. Residual gas absorption characteristics on the surface of EBCMOS passivation layer[J]. Semiconductor Optoelectronics, 2023, 44(6): 901-906.

[7] Mikhailova T, Mustafina S, Mikhailov V, et al. Application of computer simulation by the Monte Carlo method to the study of compositional heterogeneity of the product of copolymerization[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2020, 1479(1): 012073.

[8] Baeurle S A. Multiscale modeling of polymer materials using field-theoretic methodologies: a survey about recent developments[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2009, 46(2): 363-426.

[9] 周雪飞，吴　冲，唐朝云，等. 动力学蒙特卡洛(KMC)模拟薄膜生长[J]. 人工晶体学报，2012，41(3)：792-797.
Zhou Xuefei, Wu Chong, Tang Chao|Zhao) Yun), et al. Kinetic Monte Carlo (KMC) simulation of thin film growth[J]. Journal of Synthetic Crystals, 2012, 41(3): 792-797.

[10] Duan Yonghua. Adsorption of fluorine and chlorine on Mg(0001) surface: a density functional theory investigation[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2014, 24(6): 1844-1852.

[11] Liu S, Xu J, Kanai Y. Constrained nuclear-electronic orbital method for periodic density functional theory: application to H_2 chemisorption on Si(001) surfaces[J]. The Journal of Chemical Physics, 2025, 163(8): 084110.

[12] Chen Z, Yang Y. Periodic constrained nuclear-electronic orbital density functional theory for nuclear quantum effects: method development and application to hydrogen adsorption on Pt (111) [J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2025, 21(16): 7865-7877.

[13] 王宪飞，田林宇，李潘之，等. Materials Studio在金属有机框架材料中气体吸附的应用[J]. 现代化工，2021，41(11)：34-38，43.
Wang Xianfei, Tian Linyu, Li Panzhi, et al. Application of Materials Studio software for gas adsorption in metal organic framework materials[J]. Modern Chemical Industry, 2021, 41(11): 34-38, 43.

[14] 张舵咏，苏亭宇，张　宸，等. 基于GCMC的ZIF-8(Zn)对二氧化碳的吸附过程研究[J]. 工程热物理学报，2024，45(6)：1690-1695.
Zhang Duoyong, Su Tingyu, Zhang Chen, et al. Study on the sorption process of carbon dioxide by ZIF-8(Zn) based on GCMC method[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2024, 45(6): 1690-1695.

[15] Shao B, Wang S, Li T, et al. GCMC-MD prediction of adsorption and diffusion behavior of shale gas in nanopores[J]. Fuel, 2024, 377: 132696.

[16] Gholamrezai Kohan E, Mohammadi-Manesh H, Kalantari Fotooh F. DFT insight to ZnO modified SWCNT as SF_6 decomposed gases (SO_2 and SO_2F_2) detector[J]. Journal of Nanoparticle Research, 2024, 26(9): 210.

[17] Xu T, Li Q, Guan Q, et al. Atomic-scale research of the formation mechanism of passivation films on Al(111) surface[J]. Computational and Theoretical Chemistry, 2025, 1244: 115073.

[18] 张瑞恩，陈林聪，李欣然，等. Ru掺杂MoS_2对SO_2F_2和H_2S气体吸附的第一性原理研究[J]. 人工晶体学报，2023，52(2)：298-306.
Zhang Ruien, Chen Lincong, Li Xinran, et al. First-principles study of adsorption of SO_2F_2 and H_2S on the Ru doped MoS_2[J]. Journal of Synthetic Crystals, 2023, 52(2): 298-306.

[19] 柳逢春，李子锐，陈飞宇，等. 铂掺杂单层CdS对锂电池热失控气体CO、CH_4的吸附特性研究[J]. 电子元件与材料，2024，43(7)：779-786.
Liu Fengchun, Li Zirui, Chen Feiyu, et al. Adsorption and sensing properties of Pt-doped CdS monolayer for lithium-battery thermal runaway gas CO and CH_4[J]. Electronic Components and Materials, 2024, 43(7): 779-786.

[20] 刘宇鹏，侯文君，周　渠，等. 基于密度泛函理论的油中特征气体在钯掺杂SnP_3单层上吸附及传感性能研究[J]. 中国电机工程学报，2023，43(5)：2040-2050.
Liu Yupeng, Hou Wenjun, Zhou Qu, et al. Investigation on adsorption and sensing performance of characteristic gas in oil on palladium-doped SnP_3 monolayer based on density functional theory[J]. Proceedings of the CSEE, 2023, 43(5): 2040-2050.

作者简介：

岳纪鹏(2001—)，男，硕士硕士生，主要从事EBCMOS器件稳定性的研究；

陈卫军(1988—)，男，博士，副教授，博士生导师，主要从事光电成像器件、光场调控等方面的研究；

宋　德(1981—)，男，博士，副教授，硕士生导师，主要从事光电成像器件、有机太阳能电池等方面的研究。