

粒子束技术

分子取向对CO在Pd(111)面吸附的影响

[孔凡杰¹](#) [蒋刚¹](#) [傅依备²](#) [王和义²](#)

(1. 四川大学 原子与分子物理研究所, 成都 610065; 2. 中国工程物理研究院, 四川 绵阳 621900)

摘要: 用基于密度泛函理论广义梯度近似下的平面波赝势方法计算了在Pd(111)晶面两种不同CO分子取向的吸附结构。计算结果表明, CO分子碳端和氧端靠近Pd(111)面的吸附能分别为-1.75, -0.28 eV, 碳端吸附的结构比氧端吸附能力强。因此, 分子取向影响CO在Pd(111)面上的吸附, 通过控制CO的取向可能减小Pd(111)的吸附进而减弱Pd(111)面CO分子的中毒。

关键词: [分子取向](#) [Pd合金膜](#) [中毒](#) [Pd\(111\)](#) [CO](#) [表面吸附](#) [密度泛函理论](#)

通信作者: fanjiekong@gmail.com

相关文章([分子取向](#)):

[分子取向对CO在Pd\(111\)面吸附的影响](#)

[\[PDF全文\]](#)

[\[HTML摘要\]](#)

[发表评论](#)

[查看评论](#)