

## 双催化剂对A-B<sub>2</sub>类反应的最优构象

贺明峰; 康雯; 冯涛; 韩小军

大连理工大学应用数学系, 大连 116023

### 摘要:

在平面网格上将两个相邻格点定义为一个“超结构”，并在此基础上给出了一种新的元胞自动机模型用于模拟CO在 $\alpha, \beta$  NMRD双催化剂表面的氧化反应. 这里反应只在同一个超结构内发生，并以演化几率为参数，来控制超结构内反应物的反应过程. 在模拟中，以平均反应速率最大对应的构象为最优构象，给出了以 $3 \times 3$ 网格为晶胞， $\alpha$ 所占比例为 $1/9 \sim 8/9$ ，及以 $4 \times 4$ 网格为晶胞 $\alpha$ 所占比例为 $1/16 \sim 15/16$ 时的一系列 $\alpha, \beta$ 双催化剂的最优构象.

关键词: 元胞自动机 双催化剂 模拟 最优构象

收稿日期 2001-07-24 修回日期 2001-10-30 网络版发布日期 2002-02-15

通讯作者: 贺明峰 Email: mingfeng-he@263.net

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1473KB\)](#)

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

▶ [元胞自动机](#)

▶ [双催化剂](#)

▶ [模拟](#)

▶ [最优构象](#)

本文作者相关文章

▶ [贺明峰](#)

▶ [康雯](#)

▶ [冯涛](#)

▶ [韩小军](#)