

钯团簇形成和增长机理的Monte Carlo研究

郭向云

中国科学院山西煤炭化学研究所,煤转化国家重点实验室,太原 030001

摘要:

利用Monte Carlo (MC) 方法和Lennard-Jones加Axilord-Teller (LJ+AT) 势能函数,研究了气相中钯团簇的形成过程和增长机理.发现具有二十面体结构的Pd₁₃团簇可以在气相中自发形成,较大的团簇通过在Pd₁₃二十面体结构的表面添加原子组成四面体的方式形成.通过分析团簇结构和能量之间的关系,发现除了Pd₁₃和Pd₅₅以外,Pd₁₉和Pd₃₉团簇也具有五次对称性,都是比较稳定的结构.

关键词: Monte Carlo方法 Axilord-Teller 势函数 钯团簇 二十面体

收稿日期 2002-06-17 修回日期 2002-08-15 网络版发布日期 2003-02-15

通讯作者: 郭向云 Email: xyguo@sxicc.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 郭向云;钟炳;彭少逸.N₂O分解反应中复杂动力学行为的模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 873-875
2. 郭向云;钟炳;彭少逸.N₂O分解反应的动力学—Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 180-184
3. 张小岗;郭向云;钟炳;彭少逸.甲醇在超临界环己烷中形成簇团的Monte Carlo初探[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 898-903
4. 黄宏新;钟子宜;曹泽星.用变分Monte Carlo方法处理分子[J]. 物理化学学报, 1997,13(08): 706-711
5. 黄宏新.精确固定节面量子Monte Carlo差值法[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 632-636
6. 邵晓红;张现仁;汪文川.密度泛函与分子模拟计算介孔孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 538-542
7. 黄宏新.自优化剩余函数量子Monte Carlo方法[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 742-746
8. 钟闻;丁辛;唐志廉.纤维集合体内液体浸润的统计力学模型[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 682-686
9. 黄宏新;曾宪标.量子Monte Carlo处理激发态[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 681-688
10. 黄宏新;廉世勋;曹泽星.剩余函数量子Monte Carlo方法[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 599-605

扩展功能

本文信息

PDF(1301KB)

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

▶ Monte Carlo方法

▶ Axilord-Teller 势函数

▶ 钯团簇

▶ 二十面体

本文作者相关文章

▶ 郭向云