

甲基、氨基和甲胺在清洁及C(N, O)改性的Mo(100)表面的吸附

吕存琴; 凌开成; 尚贞锋; 王贵昌

太原理工大学化学化工学院, 太原 030024; 山西大同大学化学化工学院, 山西 大同 037009; 南开大学化学学院, 天津 300071

摘要:

采用广义梯度近似(GGA)的密度泛函理论(DFT), 并结合平板模型, 研究了甲基、氨基和甲胺在清洁及C(N, O)改性的Mo(100)面的吸附行为. 计算结果表明, 在较低覆盖度下($\theta=1/6$ ML(monolayer)), 吸附物种在不同表面上的稳定吸附位的吸附能变化不大; 而在较高覆盖度下($\theta=1/4$ ML), 其稳定的吸附位置可能发生变化, 且吸附能有了明显的区别. 它们在改性的Mo(100)表面吸附能较清洁表面小, 并且按C、N、O的顺序降低. 究其原因可归结为C、N、O性原子的存在使得金属表面的供电子能力减弱, 从而导致金属的d带中心的下移. 通过对金属Mo的d带性质的分析, 发现d带中心只能笼统地说明改性原子对于清洁表面的性质有一定的影响, 不能很好地体现C、N、O对于清洁表面性质影响的差异, 而dz²轨道的能量中心却能很好地反映出吸附物种在改性表面上的吸附能按C、N、O的顺序依次减小这一规律.

关键词: DFT-GGA 平板模型 吸附 Mo(100) C(N, O)改性的Mo(100)

收稿日期 2008-03-21 修回日期 2008-04-28 网络版发布日期 2008-06-11

通讯作者: 凌开成; 王贵昌 Email: wangguichang@nankai.edu.cn; lingkc@tyut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 庞先勇, 邢斌, 王贵昌, YOSHITADA Morikawa, JUNJI Nakamura. HCOO在Cu(110)、Ag(110)和Au(110)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1352-1356
2. 庞先勇; 任瑞鹏; 薛丽琴; 王贵昌. Cu(100)表面HCOO对CO₂吸附的稳定作用[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 1109-1112

扩展功能

本文信息

PDF(842KB)

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

▶ DFT-GGA

▶ 平板模型

▶ 吸附

▶ Mo(100)

▶ C(N, O)改性的Mo(100)

本文作者相关文章

▶ 吕存琴

▶ 凌开成

▶ 尚贞锋

▶ 王贵昌