

Ni(111)表面上N原子对C原子电子结构的影响

刘以良 杨缤维 蒋刚

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065; 中国工程物理研究院, 四川 绵阳 621900

摘要:

N是金刚石中的主要杂质之一, 为了研究金刚石生长过程中杂质N对C电子结构转化的影响, 用密度泛函理论研究了Ni(111)表面上C与N共吸附的三个不等价模型, 同时建立了三个C吸附模型作为比较. 计算结果表明, N原子的出现使得吸附体系相对不稳定, 吸附原子之间的相互作用不能忽略; 通过比较相互作用能可以看出, 相同的吸附位下C-C相互作用比C-N相互作用强. 通过比较不同模型中C原子分波态密度可以看出, N-C相互作用一定程度上增加了Ni的催化活性, 但是与C-C自身的相互作用比较起来效果并不明显. 吸附几何结构和分波态密度还表明, 当吸附的原子过于紧密以致占有同一个Ni(111)-(1×1)晶胞表面时, 就会形成CN化合物或者类石墨杂质.

关键词: 共吸附 吸附能 相互作用能 分波态密度

收稿日期 2008-10-08 修回日期 2008-12-10 网络版发布日期 2008-12-30

通讯作者: 蒋刚 Email: gjiang@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 田中群;李五湖;高劲松;毛秉伟.SERS谱峰对电极电位阶跃的不同响应速率的证据[J]. 物理化学学报, 1993,9 (06): 721-723
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
3. 钟起玲;王敦清;刘峰名;粟晓琼;施财辉;田中群.硫脲与多种阴离子共吸附行为的拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 562-568
4. 陈毓敏, 邓珂, 裘晓辉, 王琛.一氧化碳共吸附法确定叔丁胺分子在Cu(111)表面的吸附位[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1485-1489
5. 崔丽, 任斌, 田中群.DNA碱基与高氯酸根共吸附行为的表面增强拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

扩展功能

本文信息

PDF(1013KB)

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

▶ 共吸附

▶ 吸附能

▶ 相互作用能

▶ 分波态密度

本文作者相关文章

▶ 刘以良

▶ 杨缤维

▶ 蒋刚