

研究论文

NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算

张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠

东南大学化学化工系, 东南大学热能研究所, 南京 210096

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)中的B3LYP方法, 在LanI2DZ基组下, 对NO双分子和二聚体与铜原子簇相互作用的结构进行了研究. 结果表明, NO可以在铜表面相邻的两个铜原子上形成稳定的双分子吸附和二聚体吸附, 而在双分子吸附形式中NO以氮原子吸附在铜上的构型最稳定, 且顶点吸附的稳定性不如非顶点吸附形式. 在二聚体吸附形式中, N—N键被加强, 而N—O键被削弱的程度大于双分子吸附形式, 说明二聚体的形成有利于NO在金属铜表面的直接分解. 同时电荷布居分析表明, 单重态的二聚体与铜作用时, 铜原子上的平均电荷达到0.66 e, 说明在这种吸附形式中铜被离子化的倾向较大, 而且这种吸附形式最有利于NO的分解. 这些结果说明NO经二聚体形式在铜表面直接催化分解是可行的.

关键词: Cu₂ NO 二聚体 吸附 密度泛函理论(DFT)

收稿日期 2002-05-21 修回日期 2002-07-11 网络版发布日期 2003-03-15

通讯作者: 孙岳明 Email: sun@seu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 赵良仲; 刘芬; 张琳. LnCu₂O₄ (Ln=Gd, Nd) 电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 310-313
2. 陈学安; 陈德俊; 徐翠英; 张金彪; 朱道本; 杨德亮. 添加Cu₂S对Bi-Pb-Sr-Ca-Cu-O体系超导性的影响[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 704-709
3. 段玉华, 张开明, 伏羲路. CO和NO在CuO及Cu₂O(110)表面吸附选择规律研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(05): 407-413

扩展功能

本文信息

PDF(1248KB)

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

▶ Cu₂

▶ NO

▶ 二聚体

▶ 吸附

▶ 密度泛函理论(DFT)

本文作者相关文章

▶ 张远

▶ 曹爱年

▶ 孙岳明

▶ 刘举正

▶ 顾璠