

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

乙烯在 FeO(100) 面吸附的理论研究

[王玲玲](#) ¹ [陈文凯](#) ¹ [陆春海](#) ² [李奕](#) ¹

(¹福州大学化学系, 福建福州 350108; ²工程物理研究院, 四川绵阳 621900)

摘要 运用密度泛函理论中的广义梯度近似的 PW91 方法结合周期性平板模型, 探讨了乙烯分子在 FeO(100) 面上不同吸附位的平行吸附行为. 结果表明, 乙烯在 hollow 位上吸附最稳定, 与底物的两个 Fe 原子形成双 σ 键, 吸附能为 86.8 kJ/mol. 吸附前后的态密度、电荷布居、轨道成分和振动频率的分析结果表明, 在吸附过程中, 乙烯的 π 电子向底物转移, 同时 Fe 将 3d 轨道的电子反馈给乙烯的反键 π 轨道, 乙烯 C 的杂化方式由 sp² 部分转化为 sp³.

关键词 [乙烯](#); [氧化亚铁](#); [吸附](#); [密度泛函理论](#)