

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

Pt(111)和Pt₃Ni(111)表面上CO催化氧化反应的密度泛函理论研究

[苏海燕](#)^{1, 2} [李微雪](#)¹ [包信和](#)¹

(1 中国科学院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室, 辽宁大连 116023; 2 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 采用密度泛函理论,对Pt(111)和Pt₃Ni(111)表面上CO和O的单独吸附、共吸附以及CO的氧化反应进行了系统的研究.结果表明,Pt₃Ni(111)表面上CO的吸附弱于Pt(111)表面,O的吸附明显强于Pt(111)表面.两个表面表现出相似的CO催化氧化活性.表面Ni的存在不但稳定了O的吸附,同时也降低了过渡态O的能量.

关键词 [密度泛函理论](#); [一氧化碳](#); [氧化](#); [铂](#); [镍](#)