

Cu(100)表面吸附HCN和HNC的密度泛函研究

胡建明,李奕,李俊(上竹下钱),章永凡,周立新

福州大学化学化工学院,福州(350002)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用密度泛函方法,以原子簇Cu₁₄为模拟表面,对氢氰酸(HCN)和异氰酸(HNC)在Cu(100)表面上不同吸附位的吸附情况进行了研究.结果表明:HCN和HNC分别通过原子N和C垂直吸附在表面上时,顶位是其最佳吸附位,且是吸附能为18.5 kJ·mol⁻¹和42.6 kJ·mol⁻¹的弱吸附,计算结果与实验相符. C—N (HCN)键或N—C (HNC)键偏离垂直的分子轴线的吸附体系均不稳定.顶位吸附时HCN和HNC分子的C—N键振动频率均发生蓝移.

关键词 [吸附](#) [氢氰酸](#) [异氰酸](#) [铜](#) [密度泛函](#)

分类号 [0647](#) [0641](#)

Study of HCN and HNC Adsorption on Cu(100) by Density Functional Theory

Hu Jianming, Li Yi, Li Junqian, Zhang Yongfan, Zhou Lixin

College of Chemistry and Chemical Engineering, Fuzhou University, Fuzhou(350002)

Abstract

Key words [ADSORPTION](#) [HYDROCYANIC ACID](#) [ISOCYANIC ACID](#) [COPPER](#) [density function](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中包含“吸附”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [胡建明](#)
- [李奕](#)
- [李俊上竹下钱](#)
- [章永凡](#)
- [周立新](#)