

## 狭缝滞留吸附性质的理论研究

刘梅堂; 牟伯中

华东理工大学化学系, 上海 200237

### 摘要:

针对Gibbs系综狭缝空间的单原子分子吸附系统, 引入了分子间作用对数的校正因子对格子空间的密度泛函理论(LDFT, lattice density functional theory)进行了修正. 利用连续迭代的方法, 探讨了狭缝滞留吸附行为的微观机理. 对比了修正前后的LDFT理论对滞留吸附行为的预测结果, 发现差别较大. 原LDFT理论由于平均场近似的处理, 对滞留吸附行为预测存在系统误差.

关键词: 滞留现象 LDFT 狭缝吸附 Gibbs系综

收稿日期 2005-07-05 修回日期 2005-09-28 网络版发布日期 2006-03-10

通讯作者: 牟伯中 Email: bzmu@ecust.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(228KB\)](#)

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

[▶ 滞留现象](#)

[▶ LDFT](#)

[▶ 狭缝吸附](#)

[▶ Gibbs系综](#)

本文作者相关文章

[▶ 刘梅堂](#)

[▶ 牟伯中](#)