

气相中原子分子成簇动力学 11. 碳簇形成动力学

史扬,高振,朱起鹤,孔繁放

分子反应动力学国家重点实验室, 中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

在前文所提出的成簇动力学模型的基础上,对碳的成簇过程进行了模拟.结果表明碳簇的形成是一个任意加成的过程.随团簇尺寸增加,加成反应速度减慢.原子数目约为20—48的中等碳簇具有异常大的反应速率常数,显示了它们具有最多的碳簇边缘原子,可能为尚未封口的碗型结构.团簇形成反应,其中小团簇的解离过程更为重要.在综合考虑各种因素之后,成功地模拟出了与实验结果一致的团簇分布.对不同反应常数的分析则揭示出团簇几何构型方面的特点.

关键词: 碳簇 成簇动力学 富勒烯

收稿日期 1995-05-26 修回日期 1995-09-11 网络版发布日期 1996-03-15

通讯作者: 孔繁放 Email:

本刊中的类似文章

1. 周锡煌,刘建本,金朝霞,顾镇南,武永庆,孙亦梁.  $C_{60}$ 和 $C_{70}$ 在几种溶剂中的溶解度与温度的关系[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 4-6
2. 施祖进,周锡煌,金朝霞,顾镇南,武铁,傅华,王敬尊.  $Y_m@C_{2n}$ 的合成和表征[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 235-238
3. 史扬,高振,朱起鹤,孔繁放. 气相中原子分子成簇动力学 1. 动力学的基本模型[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 196-201
4. 黄荣彬,黄丰,刘朝阳,王春儒,林逢辰,郑兰芬. 富勒烯负离子的自聚行为[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 925-927
5. 吕建中,朱雷,宋捷,李郁芬,黄丰,黄荣彬,郑兰芬. 碳纳米管激光等离子体的质谱研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 9-11
6. 孙大勇,刘子阳,徐文国,郭兴华,刘淑莹. 稀土富勒烯与苯的气相加合[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 929-932
7. 曹保鹏,周锡煌,施祖进,金朝霞,顾镇南,肖宏展,王敬尊. 骨架掺硼富勒烯的合成及表征[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 204-206
8. 葛爱英,许并社,王晓敏,李天保,韩培德,刘旭光. 洋葱状富勒烯电磁特性的研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 203-208
9. 王晓敏,刘旭光,李天保,张艳,许并社. 洋葱状富勒烯的拉曼散射[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 731-734
10. 张材荣,陈宏善,陈玉红,魏智强,蒲忠胜. 亚甲基富勒烯衍生物(6,6)-苯基- $C_{61}$ 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
11. 李越,周锡煌,金朝霞,顾镇南,刘真泉,冯孙齐. 纳米管束的合成及结构[J]. 物理化学学报, 1995,11(07): 632-635
12. 朱永法,叶小燕,姚文清,陈德朴,曹立礼. Ar离子束作用下 $C_{60}$ 薄膜的结构稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 699-703
13. 张斌,施祖进,郝策,徐建勋,贺晓然,顾镇南.  $Ca@C_{88}$ 和 $Ca@C_{90}$ 的合成、分离和表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 573-576
14. 封伟,易文辉,王晓工,吴洪才. 聚苯胺-富勒烯复合膜的光电响应[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 795-799
15. 鲍慧强,韩培德,李天保,贾虎生,刘旭光,许并社. 洋葱状富勒烯的提纯研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 296-299
16. 柳晓伟,郭俊杰,王晓敏,刘旭光,许并社. Pt/洋葱状富勒烯催化剂的结构表征及生成机理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 967-971
17. 孙大勇,刘子阳,郭兴华,徐文国,李怡萍,刘淑莹. 电弧法和成笼内含钪的金属富勒烯 $Er@C_{2n}$ [J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1110-1113
18. 孙大勇,刘子阳,郭兴华,徐文国,李怡萍,刘淑莹.  $Gd@C_{2n}$ 的高效合成与提取[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 873-875
19. 姜宗福. 富勒烯的磁化率计算[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 852-855
20. 高云燕,欧植洋,杨国强,王雪松,张智斌,孔嵩明. 苯醌/富勒烯 $C_{60}$ 超分子与电子给体的电子转移作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 74-78
21. 梁云霄,水淼,李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯 $C_{20}$ 的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
22. 李晓东.  $C_{60}$ 富勒烯及其二聚物 $C_{100}$ 、 $C_{101}$ 的光学性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1792-1796
23. 邱介山,安玉良,李杞秀,周颖,杨青. 生物基碳包覆纳米材料(Mn,Co)的制备[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 260-264