

氧原子在Al(100)、(110)、(111)面上的吸附与振动

刁兆玉; 巫洪章; 王泽新; 张学娜; 张燕

山东师范大学化学系, 济南 250014

摘要:

利用原子与表面簇合物相互作用的5参数Morse势方法(简称5-MP)系统研究了O-Al低指数面表面吸附体系, 获得了吸附几何、结合能、振动频率等吸附态的临界点特性. 通过把这些临界点特性作为研究吸附体系的探针, 系统分析了吸附体系的性质. 理论计算结果表明, 在Al(111)面上, 氧原子在表面三重位处存在吸附态, 其垂直表面的振动频率为621(619) cm^{-1} , 平行表面的振动频率为880(887) cm^{-1} . 在子表面八面体处也存在吸附态, 其垂直振动频率为464 cm^{-1} , 平行振动频率为437 cm^{-1} ; 在Al(100)面上, 氧原子在表面四重洞位、子表面四面体处存在吸附态; 在Al(110)面上, 氧原子优先吸附在表面膺势三重位而非长桥位, 同时子表面八面体处也存在吸附态.

关键词: O-Al体系 5-MP 低指数面 表面吸附 振动

收稿日期 2007-09-20 修回日期 2007-12-18 网络版发布日期 2008-01-21

通讯作者: 王泽新 Email: wangzexin@sdun.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(768KB)

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

▶ O-Al体系

▶ 5-MP

▶ 低指数面

▶ 表面吸附

▶ 振动

本文作者相关文章

▶ 刁兆玉

▶ 巫洪章

▶ 王泽新

▶ 张学娜

▶ 张燕