

研究论文

烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应

延辉; 苑世领; 刘成卜

山东大学理论化学研究所, 济南 250100

摘要:

应用密度泛函理论(DFT)和从头计算分子动力学方法(ab initio MD)研究了不饱和烯烃在氢终止的Si(100)-2×1表面的自由基链反应. 计算表明, 自由基链反应中重要的一步是烷烃链自由基的氢抽提过程, 硅表面上邻近位置(the nearest neighbor, NN)的氢抽提比次邻近位置(the next-nearest neighbor, NNN)的氢抽提有一稍低的能垒. 从头算分子动力学显示, 过渡态的烷烃自由基与氢终止Si(100)-2×1表面上的氢原子能够很容易形成C—H键, 完成一个氢抽提过程, 同时在硅表面产生下一个孤电子, 继续引发链反应.

关键词: 从头算分子动力学 氢终止 自由基链反应 氢抽提

收稿日期 2007-08-13 修回日期 2007-09-20 网络版发布日期 2007-11-15

通讯作者: 苑世领 Email: shilingyuan@sdu.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\(1377KB\)](#)

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

▶ [从头算分子动力学](#)

▶ [氢终止](#)

▶ [自由基链反应](#)

▶ [氢抽提](#)

本文作者相关文章

▶ [延辉](#)

▶ [苑世领](#)

▶ [刘成卜](#)