

## ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>在聚并苯分子表面的吸附行为及其电子性质

王荣顺,苏忠民,傅玉洁,张景萍,陈晓兵

东北师范大学化学系;东北师范大学测试中心

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 采用量子化学CNDO/2法,从理论上探讨了ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>在聚并苯表面的吸附行为。ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>在聚并苯分子中C=C双键、C-C单键中点上方为稳定吸附位,前者吸附能最大。在其它位置吸附的ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>极易向该点迁移。EHMO-CO能带结构计算指出:ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>掺杂聚并苯中,ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>处在洞位、双键桥位及氢键位时,体系的导电性能较好,而作为电极材料,洞位可能是吸附与脱附的最佳位置。

**关键词** [高氯酸](#) [微分重叠全忽略近似](#) [能带结构](#) [表面吸附](#) [聚并苯](#) [电子性质](#)

分类号 [0647](#) [0641](#)

## Adsorption behavior of ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> on the surface of the polyacene molecule and its electronic properties

WANG RONGSHUN,SU ZHONGMIN,FU YUJIE,ZHANG JINGPING,CHEN XIAOBING

**Abstract** The adsorption behavior and electronic properties of ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> in polyacene are studied by using quantum chem. CNDO/2 method. Stable adsorption sites of ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> are found over the midpoint of chem bonds C:C and C-C of polyacene mol., and in the former site larger adsorption energy is given rise to. ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> is also easy to migrate towards C:C and C-C when it is adsorbed on the other sites. It is demonstrated by the comparison of energy band structures that the doped system has stronger conductivity if ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> is adsorbed at the hole site and bridge site of C:C, or the site forming H bond.

**Key words** [PERCHLORIC ACID](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [BAND STRUCTURES](#) [SURFACES](#) [ADSORPTION](#)

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“高氯酸”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [王荣顺](#)
- [苏忠民](#)
- [傅玉洁](#)
- [张景萍](#)
- [陈晓兵](#)