

引用信息: Li Lin-Feng; Gu Xian-Zhang; Cao Xuan; Liao Mu-Zhen; Wu Guo-Shi. Acta Phys. -Chim. Sin., 1992, 8(03): 376-382 [李林峰; 顾宪章; 曹轩; 廖沐真; 吴国是. 物理化学学报, 1992, 8(03): 376-382]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

铝原子簇上化学吸附的尺度效应及其理论模型

李林峰; 顾宪章; 曹轩; 廖沐真; 吴国是

清华大学化学系, 北京 100084

摘要:

对铝原子簇 Al_n ($n=1\sim 10, 12, 13$)已报导过的理论预测几何构型进行合理选择, 用量子化学CNDO/2法研究了单分子一氧化碳在这些簇上取不同吸附位形时的吸附作用。结果表明吸附强度随簇尺度的变化呈“幻数”特性: Al_2 、 Al_6 、 Al_{12} 簇具有特别高的吸附能, 与实验观测结果相符。采用作者建议的推广电子壳模型可合理解释这一尺度效应。对 Al_{12} 和 Al_{13} 簇电子结构的分析进一步支持了壳模型的观点。随着簇的增大, 尺度效应逐步减弱并趋向于体相铝的性质。

关键词: 微原子簇 铝原子簇 吸附 电子壳模型 一氧化碳

收稿日期 1991-03-20 修回日期 1991-09-09 网络版发布日期 1992-06-15

通讯作者: 吴国是 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1172KB)

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

▶ 微原子簇

▶ 铝原子簇

▶ 吸附

▶ 电子壳模型

▶ 一氧化碳

本文作者相关文章

▶ 李林峰

▶ 顾宪章

▶ 曹轩

▶ 廖沐真

▶ 吴国是