

CO和NO在CuO及Cu₂O(110)表面吸附选择规律研究

段玉华, 张开明, 伏羲路

复旦大学物理学系|上海 200433|中国科学技术大学化学物理系|合肥 230026

摘要:

采用离散变分 X_a 方法分别计算了CO和NO以C(或N)端顶位吸附在CuO(110)及Cu₂O(110)表面上的基态势能曲线, 结果表明: CO在Cu₂O表面上的吸附强, 而在CuO表面上的吸附弱; NO则在CuO表面上吸附强, 在Cu₂O表面上吸附弱. 它们的吸附能的大小顺序为: CuO-NO>Cu₂O-CO>Cu₂O-NO>CuO-CO. 对于CuO-NO(或CO)吸附体系, 主要是Cu的3d轨道与吸附分子的2n轨道间的相互作用; 对于Cu₂O-CO(或NO)吸附体系, 则主要是吸附质分子的5 σ 及2n分子轨道与其顶位Cu1的4s及4p轨道和侧位Cu2的3d轨道相互作用. 本文通过吸附势能曲线、态密度分析、成键分析及电荷转移量和方向等方面对实验现象做了合理的解释.

关键词: DV- X_a 方法 CO和NO选择吸附 Cu₂O(110)面

收稿日期 1994-05-28 修回日期 1994-09-12 网络版发布日期 1995-05-15

通讯作者: 段玉华 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\(1435KB\)](#)

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

[▶ DV- \$X_a\$ 方法](#)

[▶ CO和NO选择吸附](#)

[▶ Cu₂O\(110\)面](#)

本文作者相关文章

[▶ 段玉华](#)

[▶ 张开明](#)

[▶ 伏羲路](#)