

عنوان مقاله:

بررسی نظری پیوند جذبی اکسیژن با سطح (۱۱۱) Ni

محل انتشار:

مجله شیمی کاربردی روز، دوره 6، شماره 21 (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

Amir Naser Shamkhali - گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

Kobra Gharagan Abadi - گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

خلاصه مقاله:

در این بررسی، جذب سطحی اکسیژن بر روی سطح (۱۱۱) Ni در آرایش سطحی  $p(2 \times 2)$  با کسر پوششی ۰.۲۵ ML با استفاده از روش DFT مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا محاسبات بهینه سازی ساختاری انجام یافت و طول پیوند تعادلی Ni-O و فاصله اتم O از سطح بترتیب برابر  $1.87 \text{ \AA}$  و  $1.17 \text{ \AA}$  بدست آمد. سپس با تغییر مختصات اتم O بصورت استاتیک حول نقطه تعادلی و تطابق تغییرات انرژی حاصل با مدل‌های نوسانگر هماهنگ و موریس، فرکانسهای ارتعاشی O بر روی سطح Ni بدست آمد. نتایج حاصل سازگاری خوبی با داده های تجربی نشان می دهد. نتایج حاصل نشان می دهد که انرژی فرمی سطح Ni در اثر جذب سطحی O افزایش می یابد که نشانگر انتقال الکترون خالص از O به سطح است. الکترون‌گاتیوی O باعث کاهش بار جزئی مثبت آن و در نتیجه کاهش اثر ناهماهنگی مکانیکی می شود.

کلمات کلیدی:

جذب سطحی، سطح نیکل، اکسیژن، فرکانس ارتعاشی، ناهماهنگی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/2074627>

