

## عنوان مقاله:

Investigation of CO adsorption over Ag nanoclusters: A DFT study

## محل انتشار:

سومین کنفرانس سراسری نوآوری های اخیر در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

## نویسندگان:

D Sharafie - Department of Chemistry, Semnan University, P.O. Box. 35131-19111, Semnan, Iran

A Arab - Department of Chemistry, Semnan University, P.O. Box. 35131-19111, Semnan, Iran

## خلاصه مقاله:

In this work, adsorption of CO on Ag nanoclusters are studied using density functional theory. The B3PW91 hybrid functional along with the 6-31+G\* and LANL2DZ basis sets are used for all of the calculations. Adsorption energies, HOMO-LUMO gaps and vibrational properties of the cluster-CO are analysed

## کلمات کلیدی:

Ag nanocluster, DFT, CO adsorption :

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/569321>

