

分子模拟 O₂ 在 Ag 表面的吸附行为

游丽玲¹ 刘剑雄¹ 曲雯雯²

(1.昆明理工大学机电工程学院; 2.昆明理工大学理学院)

摘 要 空气中的 Ag 熔化时会溶解大量的 O₂, O₂ 在 Ag 上的吸附特性对研究其相互作用至关重要。基于分子动力学和蒙特卡洛模拟方法, 先根据吸附曲线得到了不同温度、压强下 O₂ 在 Ag(111) 表面上的吸附量, 然后建立 Ag-O₂ 体系的吸附模型, 研究了 Ag(111) 表面对 O₂ 的吸附行为。结果表明, O₂ 会大量吸附在 Ag 表面, 距 Ag 原子 0.325 nm 处 O₂ 最容易被吸附, 但随着温度升高, O₂ 在 Ag(111) 面上的自由能增加, 扩散系数增大且吸附能降低。随着压强增大, O₂ 的吸附量逐渐上升, 直至达到饱和吸附。

关键词 Ag(111) 表面; O₂; 分子动力学模拟; 吸附

中图分类号 TG146.3; O46

文献标志码 A

DOI: 10.15980/j.tzzz.2023.011.002

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Molecular Simulation of Adsorption Behavior of O₂ on Ag Surfaces

You Liling¹, Liu Jianxiong¹, Qu Wenwen²

(1.School of Mechanical and Electrical Engineering, Kunming University of Science and Technology;

2.School of Science, Kunming University of Science and Technology)

Abstract: A large amount of O₂ is dissolved when Ag in air melts, and the adsorption characteristics of O₂ on Ag are essential to investigate the interaction. Based on molecular dynamics and monte carlo simulation methods, the adsorption amounts of O₂ on Ag (111) surface under different temperatures and pressure conditions were obtained by isothermal adsorption curves, and the adsorption model of Ag-O₂ system was established to investigate the adsorption behavior of O₂ on Ag (111) surface. The results indicate that O₂ is adsorbed on Ag surface in large quantities, which is most easily adsorbed at a distance of 0.325 nm from the Ag atom. However, with the increase of temperature, the free energy and the diffusion coefficient of O₂ on Ag (111) surface are increased, and the adsorption energy is decreased. As the pressure rises, the adsorption amount of O₂ is gradually raised until reaching saturation adsorption.

Key Words: Ag(111) Surface, O₂, Molecular Dynamics Simulation, Adsorption

随着科技的迅速发展, Ag 的消费已由传统货币及饰品市场向电子、电力、通讯、计算机、化工、医疗等领域迅速扩展^[1-4]。Ag 的冶炼提纯技术较为成熟, 但基础理论研究相对滞后, 影响了其创新性的应用。因此, 积极开展 Ag 基础理论的研究具有积极意义。

Ag 固-液相间转换过程中, O₂ 会以不同的形式和速度溶入 Ag 内, 在适当条件下二次析出与释放, 并有极其微量的 O₂ 残留于 Ag 内, 对 Ag 的品质和后续利用产生重要影响。O₂ 溶入 Ag 分为两个阶段: 吸附和扩散。唐仁政等^[5]通过大量的试验和数据对 Ag 的溶氧曲线进行优化, 得到了 Ag-O 平衡相图, 且发现在 Ag 熔点(1 234.78 K)附近溶氧量会阶跃性地由 0.03% 骤增至 0.32%, 熔点处溶氧量达到最大。CHEUNG E Y

等^[6]利用固相研磨法研究了 O₂ 在 Ag 表面的吸附作用, 发现当温度低于 265 K 时, O₂ 主要以分子形态吸附在 Ag 表面; 当温度处于 300~560 K 之间时, O₂ 主要以原子形态吸附在 Ag 表面。刘卫等^[7]对 Ag 从固态向液态转变过程中 O₂ 溶入的动态行为进行了研究, 发现当温度低于熔点时, Ag 处于固态, 保持原有的面心立方晶格结构, O₂ 大量吸附于 Ag 表面, 为溶入 Ag 做好准备; 当温度高于熔点时, 由于极高的热导率, Ag 的晶格结构瞬间完全解体而发生固-液相间转换, O₂ 在 Ag 表面与内部产生了浓度差, 为平衡氧浓度, 表面的 O₂ 迅速扩散进入液态 Ag 内, 使溶氧量瞬间剧增。当前, O₂ 在 Ag 表面吸附的结构形式、动力学行为、电子耦合方式、热力学性质方面的试验和理论研究已较为充分。

收稿日期: 2022-11-14; 修改稿收到日期: 2022-12-05

第一作者简介: 游丽玲, 女, 1999 年出生, 硕士研究生, 昆明(650500), E-mail: 2095083263@qq.com

通信作者: 刘剑雄, 男, 1963 年出生, 教授, 昆明(650500), E-mail: jxlkmust@163.com

引用格式: 游丽玲, 刘剑雄, 曲雯雯. 分子模拟 O₂ 在 Ag 表面的吸附行为[J]. 特种铸造及有色合金, 2023, 43(11): 1 447-1 451.

YOU L L, LIU J X, QU W W. Molecular simulation of adsorption behavior of O₂ on Ag surfaces[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(11): 1 447-1 451.

NIEMIETZ M 等^[8]用时间分辨光电子能谱(TR-PES)研究了 Ag_n ($n=2,3,4,8$)团簇对 O_2 的光解吸动力学行为,发现 O_2 在 Ag_n 团簇上的解离化学吸附抑制了 O_2 的直接光解吸。LI W X 等^[9]利用密度泛函理论研究了 $\text{Ag}(111)$ 表面层和次表层 O_2 的吸附位、覆盖率及类似氧化的结构,结果表明低覆盖率下, O_2 倾向于吸附在 fcc 位,而高覆盖率下会形成表面氧化物结构。GOIKOETXEA I 等^[10]在半局域密度泛函理论计算的六维势能面上,用经典动力学模型模拟了 $\text{Ag}(111)$ 面上的 O_2 在不同角度和能量下的散射特性,结果发现小入射角($\theta=40^\circ$)情况下, O_2 的平动能不守恒且散射会发生高能量损失。CHEN B W J 等^[11]用周期性密度泛函理论研究了 $\text{Ag}(111)$ 面上碳氢化合物(HC)和 H_2 助 NO 的选择性催化还原反应,结果表明 O 在 fcc 的 3 重穴位吸附最稳定,且吸附能仅为 -3.29 eV 。RAWAL T B 等^[12]利用从头算和密度泛函理论研究了 O_2 在 $\text{Ag}(110)$ 面上的吸附、解离、扩散和振动行为,得出 O_2 最稳定的吸附是在穴位的 $[\bar{1}10]$ 方向,吸附能为 -0.41 eV 。YAMAMOTO S 等^[13]用低温扫描隧道显微镜(STM)对 $\text{Ag}(111)$ 表面上物理吸附 O_2 进行空间观察,经过 40 K 退火后 $\text{Ag}(111)$ 表面的 O_2 几乎全部解吸,且 O_2 的分子晶格为三角形晶格。

综上所述,研究者用不同的理论和方法对 O_2 在不同状态 Ag 表面吸附的理论、行为、状态及过程进行了深入研究,但仍需进一步完善,如 O_2 在 Ag 表面的吸附构型、稳定吸附位置、位于各个吸附位置的振动频率、高覆盖度情况下 O_2 的吸附状态等问题仍无定论。目前,分子模拟技术已广泛应用于气体分子与固体表面相互作用体系的研究^[14-18],本研究利用分子动力学和蒙特卡洛法^[19-20],建立 O_2 在 Ag 表面的吸附动力学模型,模拟 O_2 在 Ag 表面的吸附行为,进一步解释 Ag 选择性溶氧的微观机理,为利用 Ag 制氧技术提供参考。

1 模型与方法

1.1 Ag 吸附表面的确立

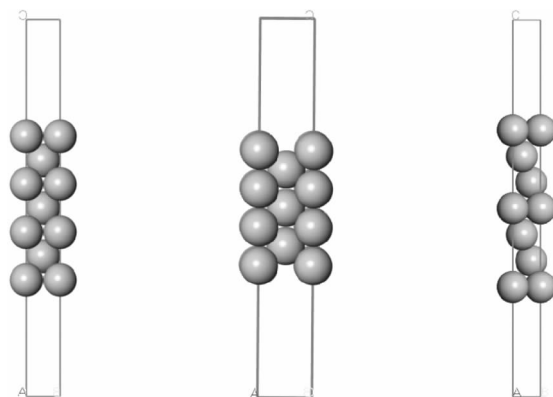
一般而言,晶面的表面能越低,暴露在外界的可能性越高^[21],因此可以利用表面能低的 Ag 表面作为吸附面来研究 O_2 在 Ag 表面上的吸附行为,表面能(γ , J/m^2)计算公式:

$$\gamma = \frac{E_{\text{slab}} - \frac{N_{\text{slab}}}{N_{\text{bulk}}}E_{\text{bulk}}}{2A} \quad (1)$$

式中, E_{slab} 为沿晶胞不同方向所切出 slab 模型的总能量, eV ; E_{bulk} 为晶胞结构的总能量, eV ; N_{slab} 为 slab 模型

的原子数; N_{bulk} 为晶胞内的原子数; A 为 slab 模型的表面积, m^2 。

运用 Materials Studio 软件导入 Ag 晶格结构,相关参数为 $a=b=c=0.408\ 57\text{ nm}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。采用 DMol³模块的广义梯度近似法(GGA-PBE)进行几何优化和表面能计算,布里渊区用 $4\times4\times1$ 的 K 点表示,几何结构优化时体系的能量收敛性判据为 $2.0\times10^{-5}\text{ Ha}$,原子间最大位移为 $0.000\ 5\text{ nm}$ 、作用力小于 $0.04\text{ Ha}/\text{nm}$,电子自洽的收敛精度为 1.0×10^{-5} 。图 1 为 Ag 晶胞上切出的 3 个低指数面 $\text{Ag}(100)$ 、 $\text{Ag}(110)$ 和 $\text{Ag}(111)$ 的 slab 模型,3 个 slab 模型的原子层数保持一致,可以使计算更精确。



(a) $\text{Ag}(100)$ (b) $\text{Ag}(110)$ (c) $\text{Ag}(111)$

图 1 Ag 低指数面的 slab 模型

Fig.1 Slab models of low exponential plane of Ag

表 1 为 $\text{Ag}(100)$ 、 (110) 、 (111) 指数面的表面能计算值。可以看出,Ag 的 3 个低指数面的表面能存在以下关系: $\gamma(110)>\gamma(100)>\gamma(111)$,表面能最低、最稳定的是 $\text{Ag}(111)$ 面。文献[6]也表明,高温下 $\text{Ag}(111)$ 面具有最低的表面能。因此,模拟计算中选择 $\text{Ag}(111)$ 面为 O_2 在 Ag 上的吸附表面。

表 1 Ag 低指数面的表面能

Tab.1 Surface energy of low exponential plane of Ag		
Ag 表面	$A/(\times 10^{-20}\text{ m}^2)$	$\gamma/(\text{J}\cdot\text{m}^{-2})$
(100)	8.346 321	0.227 863
(110)	11.803 587	0.381 535
(111)	7.228 126	0.118 287

1.2 O_2 在 Ag 表面吸附模型

为了研究 O_2 与 $\text{Ag}(111)$ 面的相互作用关系,构建 O_2 与 $\text{Ag}(111)$ 面的吸附模型。模型结构分为 3 层,第 1 层为 $\text{Ag}(111)$ 面,第 2 层为 O_2 ;为防止力场和周期性边界干扰,第 3 层设置为 2 nm 的真空层。将经优化的 $\text{Ag}(111)$ 层和预处理过的 O_2 层合并,形成 O_2 在 $\text{Ag}(111)$ 面吸附的初始模型和优化模型,见图 2。可以看出 O_2 分子几乎全部紧密贴合在 Ag 表面上,表明 Ag 表面对 O_2 具有很强的吸附能力。

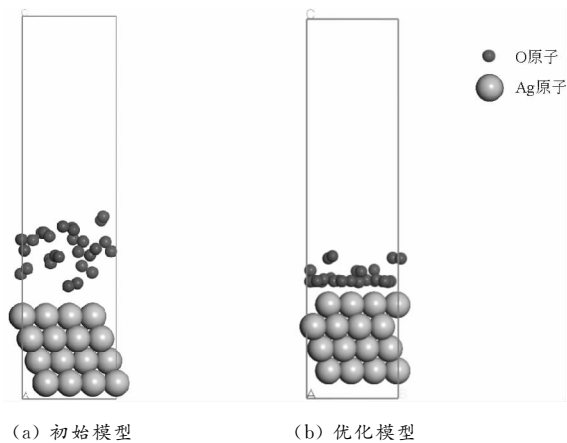


图 2 O₂ 在 Ag(111) 面吸附的模型

Fig.2 Conformation of O₂ adsorbed on Ag(111) surface

1.3 计算方法

分子模拟法是以分子、原子、离子为基础,把研究对象看作是具有一定特征的集合,运用经典力学理论,研究微观形态下分子的运动轨迹和运动规律,得到系统的宏观特性和基本规律的方法。本研究将采用分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 和蒙特卡洛 (Monte Carlo, MC) 模拟方法,研究 O₂ 在 Ag 表面的吸附行为。模拟前,选择凝聚相优化分子势 (COMPASS 力场^[22]) 描述原子间相互作用,COMPASS 力场中的总势能为成键项和非成键项能量的总和,成键项包括对角和非对角的交叉耦合项,非成键项包括静电相互作用库伦项和描述范德华相互作用的 Lennard-Jones 势。电荷分布采用 Charges 法计算,静电相互作用采用 Ewald & Group 法处理,范德华相互作用通过 Atom based 算法处理。对图 2 中的 Ag(111) 表面和 O₂ 分别进行能量最小化优化。吸附模块利用 Metropolis 采样法模拟得到温度为 300~1 200 K、压力为 1.013 25~1 013.25 kPa 条件下 Ag(111) 表面 O₂ 的吸附等温曲线,见图 3。

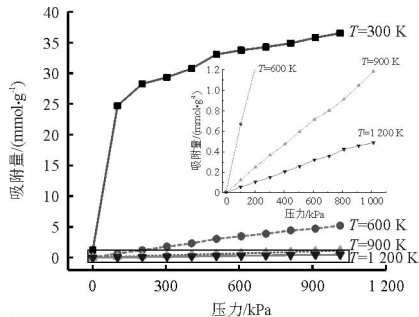


图 3 O₂ 在 Ag(111) 表面的绝对吸附等温曲线

Fig.3 Adsorption isotherm curves of O₂ on Ag(111) surface

在 Ag(111) 面吸附 O₂ 初始模型 (见图 2a) 的基础上,利用最速下降和共轭梯度串联法进行能量最小化,以消除构象重叠,随后进行分子动力学模拟,用 Verlet 法求解运动方程,选取正则 (NVT) 系综,模拟时间为

2 ns。在研究 O₂ 吸附之前,先运行 1 ns,让 Ag(111) 表面弛豫达到平衡状态,后 1 ns 用于计算分析,时间步长为 1 fs,每隔 5 ps 记录一次模拟轨迹。在 101 kPa 的初始压力下,模拟得到不同温度下 Ag(111) 面上吸附 O₂ 的状态,见图 4。

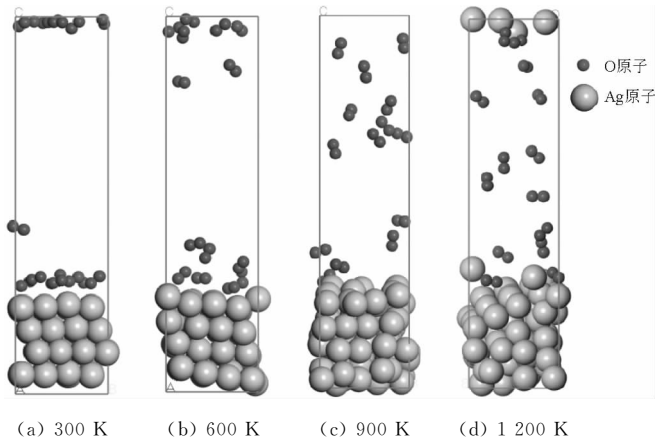


图 4 O₂ 吸附在 Ag(111) 表面的吸附状态

Fig.4 Adsorption status of O₂ on Ag(111) surface

2 试验结果与讨论

2.1 吸附量分析

分子模拟计算的吸附量为绝对吸附量,其值取决于吸附剂表面出现的吸附质的数量。从图 3 可以看出,不同温度下 Ag(111) 表面吸附 O₂ 的绝对吸附量随压力的变化规律,进而可得 O₂ 的吸附数。还可看出,同一温度下 O₂ 的绝对吸附量与压力成正比,但随着压力的增加,绝对吸附量的增长速度逐渐趋于稳定,并达到饱和状态。此外, O₂ 的绝对吸附量与温度成反比,温度越高绝对吸附量越小。温度较低时, Ag(111) 表面的吸附势能较大,而 O₂ 则首先占据高能吸附位,但随着高能吸附位被占据,剩余低能吸附位开始吸附 O₂, 表现为绝对吸附量的增长速度变缓。随着温度升高,分子间热运动加剧,分子活性增加, Ag(111) 表面吸附能力降低。因此,当 O₂ 物理吸附在 Ag(111) 表面时,温度升高使吸附体系不稳定,从而降低了 O₂ 在 Ag(111) 表面的吸附量。

2.2 表面吸附能分析

O₂ 在 Ag(111) 表面上的动态吸附过程可利用分子动力学进行模拟,结果见图 4。O₂ 在 Ag(111) 表面上的吸附能 E_{ads} 计算公式:

$$E_{ads} = E_{Ag+O_2} - E_{Ag} - E_{O_2} \quad (2)$$

式中, E_{Ag+O_2} 为吸附后体系的总能量; E_{Ag} 为吸附前 Ag 的能量; E_{O_2} 为吸附前 O₂ 的能量。

根据式 (2) 计算不同温度下 O₂ 在 Ag(111) 表面的吸附能,结果见表 2。可以看出,在 300~1 200 K 范围

内,O₂吸附能均为负值,这表明 O₂在此温度范围内均可自发吸附在 Ag 表面上,但随着温度的升高,吸附能力逐渐变弱。

表 2 不同温度下 O₂在 Ag(111)表面的吸附能
Tab.2 Adsorption energy of O₂ on Ag(111) surface at different temperatures

温度/K	吸附能/(kJ·mol ⁻¹)
300	-274.780
600	-158.774
900	-102.886
1 200	-63.061

2.3 径向分布函数分析

径向分布函数 $g(r)$ (Radial distribution function, RDF)是中心粒子在以 r 为半径的球面区域内,其他粒子出现的概率, $g(r)$ 曲线第一个峰的峰值对应的横坐标为两粒子相应结构的键长。因此对 O 和 Ag 间的 $g(r)$ 进行分析,可以得到 Ag 表面 O₂吸附的分布规律,并直观地表达出 O₂在 Ag 表面的吸附行为。

$$g(r)=\frac{\rho(r)}{\rho_b},g(r\rightarrow\infty)=1 \tag{3}$$

式中, $\rho(r)$ 为距中心粒子 r 处其他粒子的密度; ρ_b 为距中心粒子 r 的球面区域内其他粒子的平均密度。

图 5 为 O₂与 Ag(111)表面的 $g(r)$ 图。可以看出,不同温度下体系中 Ag 原子和 O 原子的距离小于 0.215 nm 时, $g(r)$ 为 0,表示 Ag 和 O 之间最近的距离不小于 0.215 nm; $g(r)$ 曲线的第一个峰的横坐标几乎没有差异,在 $r=0.325$ nm左右,这表明距离 Ag 原子为 0.325 nm 处 O 原子出现的概率最大,且 O 最容易吸附在 Ag 上;随着温度增加,峰的高度逐渐降低,这表明 Ag(111)表面吸附 O₂的量随温度升高而减少。同一温度下,O₂在 Ag(111)表面出现的概率变化没有规律,说明 O₂在 Ag(111)表面存在多个吸附层。当 $r>1.5$ nm时,曲线趋于平稳,表明超过 1.5 nm 的距离后,Ag 原子与 O 原子不再成键。

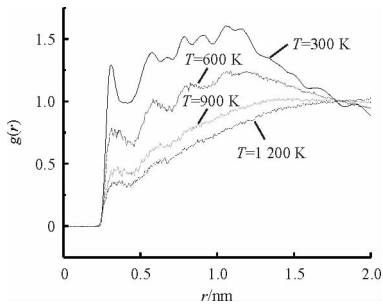


图 5 O₂与 Ag(111)表面的 $g(r)$ 图

Fig.5 $g(r)$ diagram of O₂ with Ag(111) surface

2.4 平均力势分析

吸附过程中,Ag 表面与 O₂之间的自由能用平均力

势 $W(r)$ (Potential of mean force, PMF)来描述, $W(r)$ 为在给定距离下两粒子相互作用达到稳定状态所做的功,由 $g(r)$ 计算得到^[23]:

$$W(r)=-k_{\text{B}}T\ln[g(r)] \tag{4}$$

式中, k_{B} 为玻尔兹曼常数; T 为模拟温度。

图 6 为 O₂与 Ag(111)表面的 $W(r)$ 图。可以看出,不同温度下的 $W(r)$ 在 0.305 nm 附近存在一个波谷,此处 O₂与 Ag(111)表面吸附能最小。赫姆霍兹自由能为 $W(r)$ 图中的第一个波谷与第二个波峰的能量差,由此可计算得到不同温度下 O₂的自由能大小,结果见表 3。可以看出,随着温度升高,Ag(111)表面上的 O₂自由能越来越高。

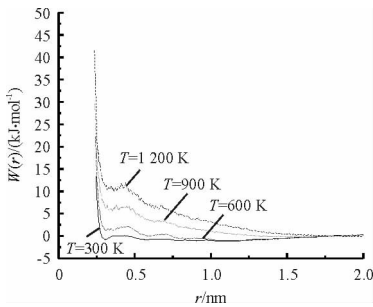


图 6 O₂与 Ag 表面的 $W(r)$ 图

Fig.6 $W(r)$ diagram of O₂ with Ag(111) surface

表 3 不同温度下 O₂的自由能

Tab.3 Free energy of O₂ at different temperatures

温度/K	波谷/(kJ·mol ⁻¹)	波峰/(kJ·mol ⁻¹)	自由能/(kJ·mol ⁻¹)
300	-0.867 64	0.117 72	0.985 36
600	1.000 49	2.589 77	1.589 28
900	5.852 24	7.526 08	1.673 84
1 200	9.745 24	12.893 74	3.148 50

2.5 均方位移分析

均方位移 (Mean square displacement, MSD)是粒子随时间移动后的位置相对于参考位置的偏差量度。自扩散系数 D 则是描述粒子随时间运动的规律变化,反映粒子的活动性。根据 Stocks-Einstein 扩散定律, D 与 M_{SD} 有关,可根据 M_{SD} 的斜率 k_{MSD} 计算得到^[24]:

$$M_{\text{SD}}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\langle|r_i(t)-r_i(0)|^2\rangle \tag{5}$$

$$D=\frac{1}{6N}\lim_{t\rightarrow\infty}\frac{\text{d}}{\text{d}t}\sum_{i=1}^N\langle|r_i(t)-r_i(0)|^2\rangle=\\ \lim\left(\frac{M_{\text{SD}}}{6t}\right)=\frac{1}{6}k_{\text{MSD}} \tag{6}$$

式中, N 为 O₂的总数; $r_i(0)$ 为初始时刻的坐标向量; $r_i(t)$ 为 t 时间后的坐标向量; $\langle|r_i(t)-r_i(0)|^2\rangle$ 为系综平均。

图 7 为不同温度下 O₂随时间变化的 M_{SD} 曲线。可以看出,随时间和温度的增加,O₂的扩散速度会加快,

且在 Ag(111) 表面的吸附能力变弱。因此, 温度越高, D 越大, 分子自由度越大, 吸附能力将会下降。由式 (6) 计算得到 300、600、900、1 200 K 下 Ag(111) 表面 O₂ 的自扩散系数分别为 2.51×10^{-8} 、 1.16×10^{-7} 、 1.46×10^{-7} 和 $1.54 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ 。

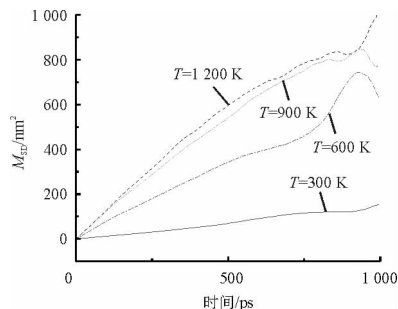


图 7 O₂ 分子随时间变化的 M_{SD}

Fig.7 M_{SD} curves of O₂ with time

3 结 论

(1) Ag(111) 表面对 O₂ 有很强的吸附能力。O₂ 的吸附量与温度成反比, 温度较低时, O₂ 在 Ag(111) 表面的吸附能力较大, 随着温度升高, 吸附能力降低; O₂ 的吸附量与压强成正比, 随着压强增大, 单位 Ag(111) 表面吸附的 O₂ 数量增加。

(2) 距离 Ag 原子 0.325 nm 处, O 原子出现的概率最大, 且 O 最容易吸附在 Ag(111) 上, O₂ 在 Ag(111) 表面能够多层吸附, 1.5 nm 以后 Ag 原子与 O 原子便不再成键。

(3) 距离 Ag 原子 0.305 nm 处, O₂ 在 Ag(111) 表面的吸附势能最小。随着温度增加, Ag(111) 表面上 O₂ 的吸附能降低、自由能增加以及自扩散系数增大。

参 考 文 献

- [1] 黄晓梅, 李国斌, 胡亮, 等. 银的提取研究进展及前景展望[J]. 稀有金属, 2015, 39(3): 268-275.
- [2] 孙晓萱, 高建新, 李杭, 等. 金属抗菌机理的研究进展[J]. 功能材料, 2020, 51(9): 9 066-9 071.
- [3] 韩玉光, 方建军, 尧章伟. 硫化铅锌矿中伴生银回收研究进展[J]. 贵金属, 2018, 39(1): 79-85.
- [4] 徐永红, 张恒飞, 王勇, 等. 稀土银基材料的发展现状[J]. 特种铸造及有色合金, 2011, 31(9): 811-815.
- [5] 唐仁政, 田荣璋. 二元合金相图及中间相晶体结构(第 4 版)[M]. 长沙: 中南大学出版社, 2009.
- [6] CHEUNG E Y, KITCHIN S J, HARRIS K D M, et al. Direct structure determination of a multicomponent molecular crystal prepared by a solid-state grinding procedure[J]. Journal of the American Chemical Society, 2003, 125(48): 14 658-14 659.
- [7] 刘卫, 刘剑雄, 郭胜惠, 等. 氧在金属银中融入与析出机制的研究[J]. 稀有金属, 2019, 43(10): 1 054-1 061.
- [8] NIEMIETZ M, KOYASU K, GANTEFOR G, et al. Dynamics of

- O₂ photodesorption from metal clusters: A significant difference from bulk behaviour[J]. Chemical Physics Letters, 2007, 438(4-6): 263-267.
- [9] LI W X, STAMPFL C, SCHEFFLER M. Subsurface oxygen and surface oxide formation at Ag(111): A density-functional theory investigation[J]. Physical Review, 2003, B67(4): 045 408.
- [10] GOIKOETXEA I, MEYER J, JUARISTI J I, et al. Role of physisorption states in molecular scattering: A semilocal density-functional theory study on O₂/Ag(111)[J]. Physical Review Letters, 2014, 112(15): 156 101.
- [11] CHEN B W J, KIRVASSILIS D, BAI Y H, et al. Atomic and molecular adsorption on Ag(111)[J]. The Journal of Physical Chemistry, 2019, C123(13): 7 551-7 566.
- [12] RAWAL T B, HONG S, PUIKKINEN A, et al. Adsorption, diffusion, and vibration of oxygen on Ag(110)[J]. Physical Review, 2015, B92(3): 035 444.
- [13] YAMAMOTO S, YOSHIDA Y, IMADA H, et al. Direct visualization of surface phase of oxygen molecules physisorbed on Ag(111) surface: A two-dimensional quantum spin system[J]. Physical Review, 2016, B93(8): 081 408.
- [14] 姚冠宇, 余隽, 吴昊, 等. 赤铁矿(100)表面的甲醛吸附特性的反应分子动力学模拟[J]. 仪表技术与传感器, 2021(3): 123-126.
- [15] 宋翠翠. 分子动力学模拟氧在过渡金属表面上的吸附[D]. 辽宁大连: 大连理工大学, 2010.
- [16] 贺永东, 李庆新. 阳极气体传质对铝液中氧化铝夹杂形成影响机理研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(7): 697-701.
- [17] DENG X X, ZHANG Q G, ZHANG Z P, et al. Adsorption and diffusion behavior of CO₂/H₂ mixture in calcite slit pores: A molecular simulation study[J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 346(15): 118 306.
- [18] 丛奇, 陈君青, 卢贵武, 等. 利用分子动力学模拟研究页岩吸附能力的影响因素及微观机理的综述[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2022, 53(9): 3 474-3 489.
- [19] ZHANG Y S, CHU B S, YU H L, et al. Molecular dynamics simulations of the initial oxidation process on ferritic Fe-Cr alloy surfaces[J]. RSC Advances, 2022, 12(16): 9 501-9 511.
- [20] LI J, LI J Q, ZHANG H L, et al. Structural characteristics and sodium penetration behaviors in anthracite cathodes: A combination study using Monte Carlo and molecular dynamics simulations[J]. Carbon Letters, 2020, 30(3): 259-269.
- [21] 汪瑜. γ -U(110) 表面吸附氧的第一性原理研究[D]. 成都: 成都理工大学, 2020.
- [22] 苑世领, 张恒, 张冬菊. 分子模拟: 理论与实验[M]. 北京: 化学工业出版社, 2016.
- [23] GLATZEL F, SCHILLING T. The interplay between memory and potentials of mean force: A discussion on the structure of equations of motion for coarse-grained observables[J]. Europhysics Letters, 2021, 136(3): 36 001.
- [24] LIU Z Q, ZHOU G, LI S L, et al. Molecular dynamics simulation and experimental characterization of anionic surfactant: Influence on wettability of low-rank coal[J]. Fuel, 2020, 279: 118 323.

(编辑: 刘晨辉)