



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

تجزیه مستقیم و به کمک هیدروژن CO روی سطح

Fe(100): مطالعه DFT

عنوان انگلیسی مقاله :

Direct versus Hydrogen-Assisted CO Dissociation on  
the Fe (100) Surface: a DFT Study



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل  
با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

## بخشی از ترجمه مقاله

## Calculation Methods

Total energy calculations were carried out with the projector augmented wave (PAW) method as implemented in the Vienna ab initio simulation package (VASP).<sup>[18–21]</sup> Spin-density-functional theory in the revised form of the Perdew–Burke–Ernzerhof exchange-correlation functional (RPBE) was employed throughout as the correct form of the generalized gradient approximation (GGA) for producing adsorption energies.<sup>[22,23]</sup> The cutoff energy for the plane wave expansion of the wave functions was 480 eV, and the k-point sampling, generated from the Monkhorst–Pack procedure,<sup>[24]</sup> used a surface mesh of  $5 \times 5 \times 1$  and a mesh for body centred cubic (bcc) bulk-Fe of  $15 \times 15 \times 15$ . The Fe(100) surface was modelled with a five layer slab and 12 Å vacuum size, within the three-dimensional supercell, and a  $p(2 \times 2)$  unit cell was used to represent the 0.25 ML CO and the 0.25 ML H coverages. The top three layers were relaxed during geometry optimization, stopping when the forces became smaller than  $0.01 \text{ eV Å}^{-1}$ .

## روشهای محاسبه

محاسبات انرژی کل با روش پروژکتور تقویت موج (PAW) اجرا گردید که در بسته شبیه سازی ابتدا به ساکن وینا VASP پیاده شده است. تئوری تابعی-چگالی - اسپین، در شکل بازبینی شده انرژی تابعی تبدلی- همبستگی پردیو-برک-ارنزرهف (RPBE) به عنوان شکل درستی از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) برای تولید انرژیهای جذب بکار گرفته شد. انرژی قطع برای انبساط موج مسطح توابع موج 480eV بود و نمونه برداری k نقطه ای بدست آمده از روش Monkhorst–Pack از شبکه (مش) سطحی  $5 \times 5 \times 1$  و شبکه ای برای Fe حجمی مکعبی مرکز پر (bcc)  $15 \times 15 \times 15$  استفاده نمود. سطح Fe (100) با تیغه پنج لایه و اندازه خلاء 12 Å در ابرسلول سه بعدی، مدلسازی گردید و از سلول واحد  $p(2 \times 2)$  برای نشان دادن پوشش های 0.25 ML CO و 0.25 ML H استفاده گردید. سه لایه بالایی (فوقانی) در طول بهینه سازی هندسه کم شده (آزاد) و زمانی که نیرو کوچکتر از  $0.01 \text{ eV Å}^{-1}$  شد، متوقف شدند.



## توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.