



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

محاسبات آب اینیشیو تجزیه هیدروژنی و مستقیم CO بر Fe(310)

عنوان انگلیسی مقاله :

Ab-initio calculations of the direct and hydrogen-assisted
dissociation of CO on Fe(3 1 0)



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

4. Conclusion

In summary, the sequence followed by the adsorption energies of all the investigated species in their most stable configuration is $C + O + H < OH + C < CH + O < CO + H < HCO < COH$. The lowest energy state corresponds to the full dissociation product $C + O + H$, and the highest energy state to COH . Both COH and HCO are strongly endothermic with respect to the most stable $CO + H$ coadsorption system. In contrast, the fully dissociated $C + O + H$ coadsorption system as well as the two recombination products $CH + O$ and $OH + C$ are exothermic with respect to the lowest energy configuration of the $CO + H$ coadsorption system. Since the direct CO dissociation is an exothermic process (-0.90 eV reaction energy) and the formation energies for both COH and HCO are strongly endothermic, along with the fact that both formation energies are much higher than the direct dissociation barrier (0.72 eV), it can be concluded that the hydrogen-assisted CO dissociation route is thermodynamically unfavourable, and the direct path is the only feasible mechanism to CO dissociation on $Fe(310)$.

4- نتیجه گیری

به طور خلاصه، توالی انرژی های بر جذب شده گونه های مورد بررسی در پایاترین پیکربندی شان عبارت است از $C+O+H < OH+C < CH+O < CO+H < HCO < COH$. کمترین وضعیت انرژی متناظر با محصول تجزیه کامل $C+O+H$ است، و بالاترین وضعیت انرژی برای COH است. هم COH و HCO شدیداً در رابطه با پایاترین سیستم بر جذب $CO+H$ گرمادوست هستند. در مقابل، سیستم بر جذب مشترک تجزیه کامل $C+O+H$ همانند دو محصول نوترکیب $CH+O$ و $OH+C$ در رابطه با کمترین پیکربندی انرژی سیستم بر جذب مشترک $CO+H$ گرمادوست هستند. از اینرو تجزیه مستقیم CO یک فرایند گرمادوست است (-0.90 eV انرژی واکنش) و انرژی های تشکیل COH و HCO شدیداً گرمادوست هستند، با این حقیقت که انرژی های تشکیل هر دو بالاتر از مانع تجزیه مستقیم است (0.72 eV)، می توان نتیجه گیری کرد که مسیر تجزیه هیدروژنی CO از نظر ترمودینامیکی نامطلوب است، و مسیر مستقیم تنها مکانیزم ممکن برای تجزیه CO بر $Fe(310)$ است.



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.

همچنین برای مشاهده سایر مقالات این رشته [اینجا](#) کلیک نمایید.