

引用信息: Li Quan; Xu Cheng-Gang; Wang Hong-Yan; Zhu Zheng-He. Acta Phys. -Chim. Sin., 2002, 18(10): 952-955 [李权;徐成刚;王红艳;朱正和. 物理化学学报, 2002, 18(10): 952-955]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 研究简报

### PuH<sub>2</sub>气态分子热力学稳定性的理论研究

李权;徐成刚;王红艳;朱正和

四川师范大学化学系, 成都 610068; 四川大学原子分子物理所, 成都 610065

#### 摘要:

用密度泛函B3LYP方法计算了PuH<sub>2</sub>分子的微观性质、不同温度下气态PuH<sub>2</sub>分子的能量(E)、熵(S)及气态PuH<sub>2</sub>分子生成反应的标准焓变 $\Delta H^{\circ}$ 、标准熵变 $\Delta S^{\circ}$ 和标准自由能变 $\Delta G^{\circ}$ . 计算结果表明, 气态PuH<sub>2</sub>分子不具有热力学稳定性.

关键词: PuH<sub>2</sub> 热力学稳定性 密度泛函理论

收稿日期 2002-01-28 修回日期 2002-04-17 网络版发布日期 2002-10-15

通讯作者: 李权 Email: liquan8866@263.net

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1304KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ PuH<sub>2</sub>

▶ 热力学稳定性

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 李权

▶ 徐成刚

▶ 王红艳

▶ 朱正和