

## Mg<sub>2</sub>NiQ<sub>6</sub> (Q=H, D, T)体系的热力学氢同位素效应

雷强华 陈长安 熊义富

表面物理与化学国家重点实验室, 四川绵阳621907

摘要:

为研究Mg<sub>2</sub>NiQ<sub>4</sub> (Q=H, D, T)体系的热力学氢同位素效应, 基于量子力学第一原理, 采用密度泛函与赝势平面波相结合的方法, 计算了Mg<sub>2</sub>NiQ<sub>6</sub> (Q=H, D, T)体系的声子色散谱, 利用声子色散谱得到了热力学函数. 利用文献报道的氢同位素气体分子的热力学数据, 采用热力学方法分析了Mg<sub>2</sub>Ni吸氢形成Mg<sub>2</sub>NiQ<sub>6</sub>的同位素效应. 研究表明, Mg<sub>2</sub>Ni吸氢的同位素效应主要是原子相对振动的频率不同导致的. CaF<sub>2</sub>结构的Mg<sub>2</sub>NiQ<sub>6</sub>的氢同位素效应随温度升高由负同位素效应转变为正同位素效应.

关键词: Mg<sub>2</sub>Ni合金 氢 同位素效应 模拟

收稿日期 2008-12-09 修回日期 2009-02-10 网络版发布日期 2009-03-26

通讯作者: 雷强华 Email: leiqianghua@sina.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1432KB)

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

▶ Mg<sub>2</sub>Ni合金

▶ 氢

▶ 同位素效应

▶ 模拟

本文作者相关文章

▶ 雷强华

▶ 陈长安

▶ 熊义富