

引用信息: FENG Jing; CHEN Jing-Chao; XIAO Bing; DU Ye-Ping; WANG Sheng-Hao; ZHANG Li-Juan. Acta Phys. -Chim. Sin., 2008, 24(11): 2007-2012 [冯晶;陈敬超;肖冰;杜晔平;王生浩;张利娟. 物理化学学报, 2008, 24(11): 2007-2012]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

Ag-Sn合金的氧化过程与热力学性质

冯晶; 陈敬超; 肖冰; 杜晔平; 王生浩; 张利娟

稀贵及有色金属先进材料教育部重点实验室, 云南省新材料制备与加工重点实验室, 昆明理工大学, 昆明 650093; 西安交通大学材料科学与工程学院, 西安 710049; 四川大学材料科学与工程学院, 成都 610064

摘要:

采用密度泛函微扰理论(DFPT)计算了Ag-Sn-O体系中O原子在Ag-Sn合金中的运动与反应, 及该体系中几种化合物的结合能、生成焓以及热容与自由能随温度的变化. 计算发现O原子存在于Ag晶格的四面体间隙, 若存在八面体间隙会使体系能量升高288.23 kJ·mol⁻¹; Sn则在Ag晶格中主要以置换形式存在. 计算得到结合能大小顺序为Ag₆O₂>SnO₂>Ag₂SnO₃>SnO>Ag₂O. SnO₂的稳定性最高, 生成焓约-591.1 kJ·mol⁻¹, SnO是一种过渡相, 而Ag₂SnO₃和Ag₆O₂为亚稳相, 都能在常温下存在, 这与相关实验结果一致. 原子间相互作用曲线说明Sn—O的成键能力明显高于Ag—O, 氧化时只会形成Sn—O键. 准谐函数近似计算(QHA)表明Ag₂SnO₃的热容远高于其它化合物, 其德拜温度约500 K, 升温能力仅为SnO₂的1/3, 可有效解决AgSnO₂电接触材料中温升过快的问题, 而布居分布和Gibbs自由能则进一步说明SnO₂是Ag-Sn-O体系中最稳定的相.

关键词: 电接触材料 AgSnO₂ 结合能 第一原理计算

收稿日期 2008-05-19 修回日期 2008-07-13 网络版发布日期 2008-09-26

通讯作者: 冯晶; 陈敬超 Email: chenjingchao@kmust.edu.cn; vdmzsfj@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(262KB)

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

▶ 电接触材料
▶ AgSnO₂
▶ 结合能
▶ 第一原理计算

本文作者相关文章

▶ 冯晶
▶ 陈敬超
▶ 肖冰
▶ 杜晔平
▶ 王生浩
▶ 张利娟