

研究论文

H在Mg(OO01)表面吸附、解离和扩散的第一性原理研究

吴广新; 张捷宇; 吴永全; 李谦; 周国治; 包新华

上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072; 北京科技大学理化系, 北京 100083; 上海大学理学院, 上海 200444

摘要:

采用基于密度泛函的第一性原理方法, 同时结合Nudged Elastic Band方法, 系统研究了H₂分子和H原子在Mg(OO01)表面的吸附过程. 给出了H₂分子的解离路径和势垒, 结果表明H₂分子的吸附过程中仅存在物理吸附; 在给出H原子在Mg(OO01)表面的吸附势能面的基础上, 进一步研究了H原子在Mg(OO01)表面及体内的扩散过程. 计算发现, Mg(OO01) slab存在表面效应, 且对H原子的表面扩散影响较明显. 在此基础上, 通过比较解离、扩散和放氢环节的激活能数据, 为H₂分子的解离和氯化物的放氢过程是速控步骤这一结论提供了理论支持.

关键词: 第一性原理 势能面 吸附能 解离 扩散

收稿日期 2007-08-27 修回日期 2007-10-12 网络版发布日期 2007-11-15

通讯作者: 张捷宇 Email: zjy6162@staff.shu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 陈琦丽 唐超群.N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO₂(101)表面电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 915-920
2. 赵庆勋;耿波;王书彪;边芳;关丽;刘保亭.氢对PbZr_{0.5}Ti_{0.5}O₃在氮氢混合气氛退火中铁电性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 183-186
3. 杜晔平;陈敬超;冯晶.不同SnO₂晶体结构的力学性能及电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 278-284
4. 张丽敏;范广涵;丁少锋.Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1498-1502
5. 陈琨;范广涵;章勇;丁少锋.N掺杂p-型ZnO的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 61-66
6. 田蒙奎;蒋丽;上官文峰;王世杰;欧阳自远.可见光响应光催化剂K₄Ce₂Ta₁₀O₃₀、K₄Ce₂Nb₁₀O₃₀及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
7. 俞江妮, 张志勇.In、Sc掺杂对SrTiO₃电子结构和光学性质的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
8. 刘建才, 张新明, 陈明安, 唐建国, 刘胜胆.含Pb铝合金表面的电化学溶解趋势[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 163-168

扩展功能

本文信息

PDF(1643KB)

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

▶ 第一性原理

▶ 势能面

▶ 吸附能

▶ 解离

▶ 扩散

本文作者相关文章

▶ 吴广新

▶ 张捷宇

▶ 吴永全

▶ 李谦

▶ 周国治

▶ 包新华