

研究论文

锰欠电位沉积的密度泛函计算与循环伏安实验的研究

李文坡 张胜涛\* 杨林台 魏子栋

(重庆大学化学化工学院 重庆 400044)

收稿日期 2008-6-19 修回日期 2008-10-16 网络版发布日期 2009-4-2 接受日期 2008-11-3

摘要

用密度泛函计算和循环伏安法研究了锰在金和铅表面的欠电位沉积(UPD)行为. 理论计算, 假设生成紧密的二维相(2D)欠电位沉积层, 用基于密度泛函理论的DMol3软件计算在金与铅表面生成2D相锰层的欠电位偏移值  $\Delta E_{UPD}$ , 证明锰在金表面可发生欠电位沉积, 而在铅表面不能发生欠电位沉积. 循环伏安实验结果与理论计算不一致: 金电极析氢电位高不利于研究锰的还原沉积反应, 没有发现锰的欠电位沉积现象; 铅电极在MnCl<sub>2</sub>溶液中有锰的欠电位沉积现象. 这种理论计算与电化学实验结果的差异, 主要是因为理论计算没有考虑溶剂与阴离子特性吸附作用的影响, 理论计算模型是电化学实验体系的一种理想模型.

关键词

[锰](#) [欠电位沉积](#) [密度泛函计算](#) [循环伏安法](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张胜涛 [stzhang@cqu.edu.cn](mailto:stzhang@cqu.edu.cn)

作者个人主页:

李文坡 张胜涛\* 杨林台 魏子栋

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (379KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[锰” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [李文坡,张胜涛,杨林台,魏子栋](#)