

具有高能密特性的铝团簇氢化物

Stable High-Energy Density Super-Atom Clusters of Aluminum Hydride

摘要点击 45 全文点击 25 投稿时间: 2011-11-8 采用时间: 2012-2-12

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/02/147-152

中文关键词 [密度泛函](#) [铝团簇](#) [高能密材料](#)

英文关键词 [High-energy density](#) [Super-atom](#) [First principles](#) [Cluster of aluminum hydride](#)

基金项目

| 作者 | 单位 | E-mail |
|----------------------|---|-------------------|
| 连科研 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012; 瑞典皇家理工学院理论化学系 | |
| 姜远飞 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012 | |
| 费德厚 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012 | |
| 冯伟 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012 | |
| 金明星 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012 | |
| 丁大军* | 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林130012 | dajund@jlu.edu.cn |
| 罗毅 | 瑞典皇家理工学院理论化学系; 中国科学技术大学微尺度物质科学国家实验室, 合肥230026 | |

中文摘要

通过第一性原理计算得到了稳定的 $(AlH_3)_n$ 的笼形结构。 $(AlH_3)_n$ 笼形结构中的铝团簇骨架具有 n 个顶角, $2n$ 条Al-Al边, 吸附的氢原子中有 n 个位于顶位, 与Al原子形成共价键, $2n$ 个位于桥位, 同铝原子一起构成了Al-H-Al的笼形骨架. 以 $Al_{12}H_{36}$ 的笼形结构为单元得到了 $(Al_{12}H_{36})_n$ 的链状结构, 该链状结构与 $(AlH_3)_n$ 的链状结构具有相同的链接方式. 同时 $Al_{12}H_{36}$ 的热力学性质研究表明其可能成为一种高能密材料.

英文摘要

With the concept of super-atom, first principles calculations propose a new type of super stable cage clusters Al_nH_{3n} that are much more energetic stable than the well established clusters, Al_nH_{n+2} . In the new clusters, the aluminum core-frame acts as a super-atom with n vertexes and $2n$ Al-Al edges, which allow to adsorb n hydrogen atoms at the top-site and $2n$ at the bridge-site. Using $Al_{12}H_{36}$ as the basic unit, stable chain structures, $(Al_{12}H_{36})_m$, have been constructed following the same connection mechanism as for $(AlH_3)_n$ linear polymeric structures. Apart from high hydrogen percentage per molecule, calculations have shown that these new clusters possess large heat of formation values and their combustion heat is about 4.8 times of the methane, making them a promising high energy density material.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计