中国有色金属学报
中国有色金属学报(英文版)
中国科学技术协会 主管
中国有色金属学会 主办

论文摘要

中国有色金属学报
ZHONGGUO YOUSEJINSHUXUEBAO XUEBAO
第10卷 第4期 (总第37期) 2000年8月

[PDF全文下载] [全文在线阅读]

文章编号：1004-0609(2000)04-0480-04

稀土系贮氢合金的生成焓计算

罗永春， 康 龙， 张昌青， 陈剑虹

(甘肃工业大学 材料工程系， 兰州 730050)

摘 要： 利用Miedema理论和几何模型计算了二元合金系La M， Ni M和三元合金系$LaNi_{5-x}M_x$ (M=Co， Mn， Al， Cr， Fe， Cu)的生成焓。 对二元合金系， 计算结果与已有实验结果在 x_M≥70%(摩尔分数)范围符合得较好； 三元合金系计算结果表明， 当分别添加合金组元Mn， Co， Cr， Fe和Cu时， $LaNi_{5-x}M_x$ 的生成焓不同程度地增大， 其中Cr， Fe和Mn的影响较大， 而添加Al时生成焓明显减小。 讨论了生成焓对合金高温氢化时发生歧化反应的影响，合金的生成焓越大， 越有利于歧化反应。

关键字： Miedema理论； 稀土系贮氢合金；生成焓

Calculation of formation enthalpies for rare earth basedternary hydrogen storage alloys

LUO Yong chun， KANG Long， ZHANG Chang qing， CHEN Jian hong

（Department of Materials Engineering， Gansu University of Technology， Lanzhou 730050， P.R.China）

Abstract: Miedema theory and geometrical model were usedto calculate the formation enthalpies of binary alloys La M, Ni M and ternary hydrogen storage alloys $LaNi_{5-x}M_x$ (M=Co， Mn， Cr， Fe， Cu， Al). For binary alloys system La M and Ni M(M=Co， Mn， Al， Cr， Fe， Cu， Ga)， the calculated results are consistent well with the available experimental data in the range of x_M≥70%. Forthe ternary alloys， the calculated results indicate that the substitution of elements Mn， Co， Fe， Cr and Cu for Ni can increase the formation enthapies of $LaNi_{5-x}M_x$ in different degree， and Cr， Fe， Mn have more significant effects, while the addition of Al remarkably lowers the enthalpies. The effect of the formation enthalpy on disproportionnation reaction of the alloys in the process of hydriding at high temperatures is discussed, and it is found that the greater the enthalpies of alloys are， the more favorable it is for the disproportionation reaction.

Key words: Miedema theory； rare earth hydrogen storagealloys; enthalpy of formation

地 址：湖南省长沙市岳麓山中南大学内 邮编： 410083

电 话： 0731-88876765，88877197, 88830410 传真： 0731-88877197

电子邮箱： f-ysxb@mail.csu.edu.cn