

研究论文

磷化镍晶体结构的密度泛函理论研究

[任君](#) [王建国](#) [李俊汾](#) [李永旺](#)

(中国科学院山西煤炭化学研究所 煤转化国家重点实验室, 山西 太原 030001)

摘要 运用密度泛函理论系统地研究了已知的磷化镍晶体如Ni₃P、Ni₁₂P₅、Ni₂P、Ni₅P₄、NiP、NiP₂和NiP₃等的结构、成键以及相关的热力学稳定性,对于结构简易化合物(Ni₂P和NiP₃)的弹性行为进行了预测。这些数据有助于更好的理解磷化镍的催化活性。

关键词 [磷化镍](#); [晶体结构](#); [密度泛函理论](#); [催化活性](#)

收稿日期 2007-1-17 修回日期 2007-3-21

通讯作者 任君 junren2003@sxicc.ac.cn

DOI 分类号 074; 0643

