

研究论文

水蒸汽在Pd表面吸附的热力学

孙希媛; 孔凡杰; 蒋刚; 朱正和

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065

摘要:

用密度泛函方法和相对论有效原子实势分别对PdOH₂、PdOH及PdO的几何构型进行了优化,得到PdOH₂分子为Cs构型, Pd与H₂O分子不在同一平面, RPdO=0.2283 nm; PdOH分子为2A'态, RPdO=0.1965 nm, ROH=0.0968 nm, ∠PdOH=110.186°; PdO分子基态为3Π, RPdO=0.1858 nm. 根据电子-振动近似理论计算了不同温度下金属Pd与H₂O、OH及游离态O原子反应的生成热力学函数,导出了反应平衡压力随温度的变化关系,分析认为水蒸汽引起Pd合金膜中毒是由于H₂O分子的离解产物OH和O原子吸附在膜表面所致.

关键词: PdOH₂ PdOH PdO 热力学函数 解离吸附 中毒

收稿日期 2006-10-27 修回日期 2006-12-21 网络版发布日期 2007-04-11

通讯作者: 蒋刚 Email: gjiang@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(199KB)

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

▶ PdOH₂

▶ PdOH

▶ PdO

▶ 热力学函数

▶ 解离吸附

▶ 中毒

本文作者相关文章

▶ 孙希媛

▶ 孔凡杰

▶ 蒋刚

▶ 朱正和