

氢原子在平坦金属锂(100)面上表面扩散行为的ab initio研究

王泽新,关大任,蔡政亭,丁世良,邓从豪

青岛化工学院应用化学系;山东大学理论化学研究室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文用Li7(4,3)-H和Li9(5,4)-H小原子簇模拟氢原子在平坦金属锂(100)面吸附体系,取小基组作了各吸附位吸附势能曲线及相应分子轨道能级图、吸附和表面扩散势能面的ab initio研究。结果表明,氢原子优先吸附在配位数较高的吸附位上,并倾向于由高配位数吸附位向低配位数吸附位迁移,表面扩散各向异性,扩散跳跃步长与锂单晶晶格原子间距数量级相同。从吸附和表面扩散势能确定了最低能量表面扩散途径,分析了原子在平坦金属表面上迁移的微观过程。

**关键词** [氢](#) [锂化合物](#) [簇状化合物](#) [能级](#) [从头计算法](#) [分子轨道理论](#) [活化能](#) [扩散](#) [势垒](#) [各向异性](#) [表面吸附](#) [势能面](#)

分类号 [064](#) [0647](#)

## Surface diffusion of a hydrogen atom on smooth lithium(100) surface using ab initio cluster study

WANG ZEXIN, GUAN DAREN, CAI ZHENGTING, DIN SHILIAN, DENG CONGHAO

**Abstract** The behavior of H atom adsorbed on smooth Li(100) surface was studied by using Li3(4.3)-H and Li9(5.4)-H small atomic cluster models. The potential curve of the adsorbed atoms and the diffusion potential and the adsorption of mechanism were determine From these results the shortest diffusion length of H on smooth Li surface can be calculated

**Key words** [HYDROGEN](#) [LITHIUM COMPOUNDS](#) [CLUSTER COMPOUND](#) [ENERGY LEVELS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ACTIVATION ENERGY](#) [DIFFUSION](#) [POTENTIAL BARRIER](#) [ANISOTROPY](#) [SURFACES ADSORPTION](#) [POTENTIAL ENERGY SURFACES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(368KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“氢”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王泽新](#)
- [关大任](#)
- [蔡政亭](#)
- [丁世良](#)
- [邓从豪](#)