

LiAlH₄与Li₃AlH₆的成键特性及热力学稳定性

梁初; 黎光旭; 蓝志强; 刘奕新; 韦文楼; 郭进

广西大学物理科学与工程技术学院, 教育部有色金属材料及其加工新技术重点实验室, 南宁 530004

摘要:

采用基于密度泛函理论(DFT)的平面波赝势(PW-PP)方法, 计算了LiAlH₄分解反应中各个产物的晶胞参数、电子结构、生成焓和分解反应的反应焓. 反应中各固态、气态物质的晶胞的结构优化后的晶格参数与相应的实验值均符合得较好. 对LiAlH₄与Li₃AlH₆的电子结构分析均表明, 其中的Al—H键为共价键、Li—H键为离子键. 对各分解反应的反应焓计算结果表明, (1) LiAlH₄→1/3Li₃AlH₆+2/3Al+H₂, (2) 1/3Li₃AlH₆→LiH+1/3Al+1/2H₂及(3) LiH+Al→LiAl+1/2H₂均为吸热反应, 298 K时计算的反应焓分别为14.3、14.9 与50.9 kJ·mol⁻¹, 与相应的实验值符合得较好.

关键词: Li-Al-H络合物 电子结构 成键特征 热力学稳定性

收稿日期 2007-10-17 修回日期 2007-11-07 网络版发布日期 2008-01-21

通讯作者: 郭进 Email: guojin@gxu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(392KB\)](#)

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

- ▶ [Li-Al-H络合物](#)
- ▶ [电子结构](#)
- ▶ [成键特征](#)
- ▶ [热力学稳定性](#)

本文作者相关文章

- ▶ [梁初](#)
- ▶ [黎光旭](#)
- ▶ [蓝志强](#)
- ▶ [刘奕新](#)
- ▶ [韦文楼](#)
- ▶ [郭进](#)