

引用信息: LI Lei; SANG Ge; ZHANG Peng-Cheng; JIANG Gang. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(12): 1912-1916 [李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚. 物理化学学报, 2007, 23(12): 1912-1916]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 研究论文

### $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氢微观机制研究

李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065; 表面物理与化学国家重点实验室, 四川 绵阳 621907

#### 摘要:

采用基于密度泛函理论广义梯度近似下的平面波赝势方法研究了刚玉( $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)的阻氢微观机制, 对氢原子在 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>中的占据结构进行了计算, 发现氢原子占据空隙位置时能量最低, 寻找其过渡态得到活化能为1.59 eV, 利用动力学计算得到了氢原子在 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>中的扩散系数表达式为 $D(T)=(3.37 \times 10^{-7})\exp(-1.59/kT)$ . 结果表明, 氢原子占据在 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>八面体空隙处的结构最稳定; 低温时扩散难以发生; 高温时扩散沿着空隙方向.

关键词:  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 氢扩散 密度泛函理论

收稿日期 2007-06-13 修回日期 2007-08-20 网络版发布日期 2007-09-21

通讯作者: 蒋刚 Email: gjiang@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(492KB)

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

▶  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

▶ 氢扩散

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 李磊

▶ 桑革

▶ 张鹏程

▶ 蒋刚