

量子化学及计算化学

含Pb铝合金表面的电化学溶解趋势

刘建才, 张新明, 陈明安, 唐建国, 刘胜胆

中南大学材料科学与工程学院, 长沙 410083

摘要:

利用一个简单层状模型通过第一性原理的密度泛函理论研究了表面Pb含量变化对Al(100)表面Al原子的化学势和电化学溶解电势的影响规律. 计算结果表明, 当表面层Pb含量为1/9、1/4、1/2和3/4 ML(monolayer)时, 与纯铝相比, 表面Al原子的化学势分别升高了0.13、0.17、0.57和0.64 eV, 表面Al原子的溶解电极电势分别偏移了-0.04、-0.06、-0.19和-0.21 V. 溶解电势向负方向偏移, 表明含Pb的Al(100)表面的Al原子在更低的电势条件下就可以溶解了. 同时, 表面Pb含量不同会引起表面Al原子向内不同程度的弛豫, 导致表面Al的化学环境和表面结构发生变化, 进一步表明金属表面原子的化学势和溶解电极电势受原子周围的化学环境的影响. 表面Mulliken电荷布居分析证实, 随着表面Pb含量增加, Pb原子与Al原子之间的电荷交换作用增强, 使表面Al原子总的负电荷数增加, 导致表面电位下降, 表面功函数也减小, 也促使Al表面更易于发生电化学腐蚀反应.

关键词: 第一性原理 表面 化学势 溶解电极电势 Mulliken电荷布居

收稿日期 2009-08-25 修回日期 2009-10-29 网络版发布日期 2009-12-03

通讯作者: 张新明 Email: xmzhang_cn@yahoo.cn

本刊中的类似文章

1. 陈琦丽 唐超群.N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO₂(101)表面电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 915-920
2. 赵庆勋; 耿波; 王书彪; 边芳; 关丽; 刘保亭. 氢对PbZr_{0.5}Ti_{0.5}O₃在氮氢混合气氛退火中铁电性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 183-186
3. 杜晔平; 陈敬超; 冯晶. 不同SnO₂晶体结构的力学性能及电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 278-284
4. 张丽敏; 范广涵; 丁少锋. Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1498-1502
5. 吴广新; 张捷宇; 吴永全; 李谦; 周国治; 包新华. H在Mg(0001)表面吸附、解离和扩散的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 55-60
6. 陈琨; 范广涵; 章勇; 丁少锋. N掺杂p-型ZnO的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 61-66
7. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂K₄Ce₂Ta₁₀O₃₀、K₄Ce₂Nb₁₀O₃₀及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
8. 贡江妮, 张志勇. In、Sc掺杂对SrTiO₃电子结构和光学性质的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

扩展功能

本文信息

PDF(843KB)

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

▶ 第一性原理

▶ 表面

▶ 化学势

▶ 溶解电极电势

▶ Mulliken电荷布居

本文作者相关文章

▶ 刘建才

▶ 张新明

▶ 陈明安

▶ 唐建国

▶ 刘胜胆