

### 论文摘要

中国有色金属学报

ZHONGGUO YOUSEJINSHUXUEBAO XUEBAO

第19卷 第1期 (总第118期) 2009年1月

 [PDF全文下载]  [全文在线阅读]

文章编号: 1004-0609(2009)01-0108-06

## Li-Al-N-H系络合物贮氢反应的第一性原理研究

刘奕新, 梁 初, 蒋 龙, 黎光旭, 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Li-Al-N-H系络合物贮氢反应中各个化合物的晶胞参数、电子结构、生成焓和贮氢反应的反应焓。结果表明:  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$ 的Li-N、Al-N键主要为离子键,  $\text{LiNH}_2$ 的N-H键主要为共价键, Li-N键主要为离子键; 298 K时贮氢反应的反应焓计算值分别为-23.7和-55.3 kJ/mol, 与实验值均符合得较好; 反应中各固态、气态物质的晶胞的结构优化后的晶格常数、键长与键角等与相应的实验值均符合较好。

**关键字:** Li-Al-N-H络合物; 电子结构; 反应焓; 第一性原理

## Investigations on Li-Al-N-H complex for hydrogen storage by first principle

LIU Yi-xin, LIANG Chu, JIANG Long, LI Guang-xu, WEI Wen-lou, GUO Jin

(Key Laboratory of National Education Ministry for Nonferrous Metals and Materials Processing Technology, College of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning 530004, China)

**Abstract:** The cell parameters, electronic structures, formation enthalpies and reaction enthalpies of  $\text{LiNH}_2$  and  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  were investigated using plane-wave pseudo-potential method based on density function theory. The results show that the calculated cell parameters are in agreement with the experimental ones. The interactions between Li-N and Al-N are strong ionic bonds in  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$ . The interaction between N and H is strong covalent bond and the interaction between Li and N is strong ionic bond in  $\text{LiNH}_2$ . The calculated reaction enthalpies are -23.7 and -55.3 kJ/mol, respectively, which are in agreement with the experimental ones.

**Key words:** Li-Al-N-H complex; electronic structure; reaction enthalpy; first principle

版权所有：《中国有色金属学报》编辑部

地 址：湖南省长沙市岳麓山中南大学内 邮编： 410083

电 话： 0731-8876765, 8877197, 8830410 传真： 0731-8877197

电子邮箱： [f-yssxb@mail.csu.edu.cn](mailto:f-yssxb@mail.csu.edu.cn)