

研究论文

电场中B₂分子特性研究

闫安英^a, 宋晓书^b 姜 明^a

(^a西南民族大学电气信息工程学院 成都 610041)

(^b贵州师范大学理学院 贵阳 550001)

收稿日期 2009-4-10 修回日期 2009-6-17 网络版发布日期 2009-10-14 接受日期 2009-7-14

摘要

利用密度泛函理论(DFT)B3LYP/6-311+G(2d)方法研究在不同方向电场(0~+0.02 a.u.)作用下的B₂分子的基态键长、总能量、偶极矩、最高占据轨道(HOMO)能量、最低空轨道(LUMO)能量、能隙及势能曲线的变化规律。结果表明:在一定外加电场范围内,随电场强度的增大,分子键长变大;总能量降低;偶极矩增大;HOMO能级、LUMO能级均降低;能隙依赖外电场方向,平行分子轴(Z)方向电场使能隙递减,垂直分子轴(X)方向电场使能隙递增;分子势能降低,平行分子轴(Z)方向电场对分子势能的影响随着核间距的增大而增大,原有的“势能平台”遭到破坏。

关键词 [B₂](#) [密度泛函理论\(DFT\)](#) [外电场](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

闫安英 yanganying@tom.com

作者个人主页:

闫安英^a;a 宋晓书^b 姜 明^a

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(247KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“B₂”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [闫安英,宋晓书,姜明](#)