高等学校化学学报 2006, 27(6) 1106-1108 DOI: ISSN: 0251-0790 CN: 22-1131/O6

论文

富勒烯结构Si_{60}的从头算研究

甘利华, 舒春英, 王春儒

中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

采用量子化学从头算方法, 系统地研究了Si_{60}-I_h及其各种降低对称性后的扭曲构型的稳定性. 找到了5个低能量低对称性(对称性分别为T, C_i, C_1, C_S和C_2) Si_{60}的稳定结构. 分析计算结果表明, 典型的低能量Si_{60}结构对应着一些硅原子凸出球外和一些硅原子凹进球内, 部分Si原子间的成键呈sp^3杂化方式.

关键词: Si60团簇 富勒烯结构 从头计算

Ab initio Study of Fullerene like Structures of Si_{60}

GAN Li-Hua, SHU Chun-Ying, WANG Chun-Ru*

Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

Abstract:

Ab initio calculations were performed on $Si_{60}(I_h)$ and its several lower symmetrical structures. Five stable structures of spherical Si_{60} with T, C_i, C_1, C_s and C_2 symmetries were found by following the imaginary frequency vibrations of $Si_{60}(I_h)$, $Si_{60}(D_{3d})$ and $Si_{60}(T_h)$. The calculated results demonstrate that some silicon atoms pop out and some shrink inward in the five favored structures of Si60, leading to form sp3 hybridization of silicon. These results will provide insight into the formation and stability of nanoscale silicon clusters.

Keywords: Si_{60} cluster Fullerene like structure Ab initio calculations

收稿日期 2005-05-26 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 王春儒

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 李爱玉 ; 文玉华 ; 朱梓忠 ; 杨勇 .超细钛金属线的电子性质[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1323-1326
2. 潘清江,周欣,张红星,付宏刚 .Au(Ⅰ)电荷转移配合物光谱性质的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28

扩展功能
本文信息
Supporting info
PDF(316KB)
[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
文章反馈
浏览反馈信息
本文关键词相关文章
Si60团簇
富勒烯结构
从头计算
本文作者相关文章
甘利华
舒春英
王春儒
甘利华
舒春英
王春儒
PubMed
Article by
Article by
Article by
Article by
Article by
Article by

(2): 330-333
3．严六明,纪晓波,朱素华,陆文聪 .分子结的非弹性隧道谱和电子-振动的耦合[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2381-2384
4． 矫玉秋,潘清江, ,张红星 .$[Au(PH_3)]^+$修饰的芳香基炔基配合物发光机制的从头计算研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 159-164
5．矫玉秋,潘清江,张红星 .$[Au(PH_3)]^+$修饰下苯的激发态性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 389-395

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-11-16	frsahfkjsdagjk	hsjkafh@sdk.com	ugg boots	Ugg Boots Sale Online Ugg Boots Discount Uggs Di Ugg Ugg Shoes Sa Sale Cheap Ugg Cheap Uggs ugg

Copyright 2008 by 高等学校化学学报