

## 碱金属和重金属叠氮化物的感度和导电性研究

肖鹤鸣; 李永富; 钱建军

南京理工大学化学系, 南京 210014

### 摘要:

分别用EHCO和DV-X<sub>α</sub>方法, 计算研究了α-NaN<sub>3</sub>、β-NaN<sub>3</sub>和AgN<sub>3</sub>的能带结构和原子簇电子结构. AgN<sub>3</sub>与NaN<sub>3</sub>相比: 带隙(ΔE<sub>g</sub>)较小、带宽(BW)较大, 因而电导率较大. 比较前沿晶体轨道(CO)和前沿分子轨道(MO)的能级、组成及电子在其间的跃迁; 预示AgN<sub>3</sub>比NaN<sub>3</sub>更敏感、更易分解和起爆. 还从电子微观层次揭示了金属叠氮化物的导电性和爆炸性之间的联系.

关键词: 金属叠氮化物 感度 导电性 EHCO方法 DV-X<sub>α</sub>方法

收稿日期 1992-07-09 修回日期 1993-02-06 网络版发布日期 1994-03-15

通讯作者: 肖鹤鸣 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(965KB)

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

▶ 金属叠氮化物

▶ 感度

▶ 导电性

▶ EHCO方法

▶ DV-X<sub>α</sub>方法

本文作者相关文章

▶ 肖鹤鸣

▶ 李永富

▶ 钱建军