

引用信息: ZHANG Cai-Rong; CHEN Hong-Shan; CHEN Yu-Hong; FENG Wang-Jun; LI Wei-Xue; XU Guang-Ji; KOU Sheng-Zhong. Acta Phys. -Chim. Sin., 2005, 21(12): 1368-1372 [张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1368-1372]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

Al₈P₈团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究

张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中

兰州理工大学理学院; 有色金属新材料国家重点实验室, 兰州 730050; 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070

摘要:

用密度泛函理论(DFT)中的杂化密度泛函B3LYP方法, 在6-31G*水平上对Al₈P₈团簇的环状结构进行了几何结构优化, 并在同一水平上计算了Al₈P₈团簇的电子结构、振动特性及极化率和超极化率. 用自然键轨道(NBO)方法分析了成键性质, Al₈P₈团簇中离子键和共价键共存, 而且在不同轨道中原子间成键有不同的杂化方式. 计算结果表明: 优化后的Al₈P₈团簇为双层环状结构; 价电子态密度显示其电子结构具有半导体的性质; 最强的IR和Raman谱峰分别位于530.65 cm⁻¹和366.54 cm⁻¹处.

关键词: Al₈P₈团簇 密度泛函理论 结构与性质

收稿日期 2005-05-09 修回日期 2005-07-06 网络版发布日期 2005-12-15

通讯作者: 张材荣 Email: zhcrxy@lut.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1472KB\)](#)

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

▶ [Al₈P₈团簇](#)

▶ [密度泛函理论](#)

▶ [结构与性质](#)

本文作者相关文章

▶ [张材荣](#)

▶ [陈宏善](#)

▶ [陈玉红](#)

▶ [冯旺军](#)

▶ [李维学](#)

▶ [许广济](#)

▶ [寇生中](#)