

## N<sub>2</sub>O多层膜局域结构的多重散射簇理论研究

吴太权;; 沈少来; 曹松; 李海洋

浙江大学物理系, 杭州 310027

### 摘要:

利用多重散射簇(multiple scattering cluster, MSC)方法计算了N<sub>2</sub>O多层膜中氮原子的1s芯态近边X射线吸收精细结构(near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS)谱,首次给出N<sub>2</sub>O多层膜局域结构的模型. MSC研究显示多层膜中N<sub>2</sub>O分子以短程有序的分层错位链结构排列,并求得链中相邻分子间距为0.233 nm和相邻分子层之间距离为0.240~0.245 nm.用自洽场离散变分(discrete variation, DV)X $\alpha$ 方法计算的N<sub>2</sub>O多层膜电子结构支持了MSC的计算结果;阐明了NEXAFS谱中弱结构的物理起源.对N<sub>2</sub>O多层膜中分子之间相互作用的分析显示N<sub>2</sub>O多层膜的结构具有分子自组装的特性.

关键词: 多重散射簇方法 近边X射线吸收精细结构 N<sub>2</sub>O多层膜局域结构 DV-X $\alpha$ 方法

收稿日期 2004-03-24 修回日期 2004-06-17 网络版发布日期 2004-11-15

通讯作者: 唐景昌 Email: buckyball@zju.edu.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\(1542KB\)](#)

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

▶ [多重散射簇方法](#)

▶ [近边X射线吸收精细结构](#)

▶ [N<sub>2</sub>O多层膜局域结构](#)

▶ [DV-X \$\alpha\$ 方法](#)

本文作者相关文章

▶ [吴太权](#)

▶ [沈少来](#)

▶ [曹松](#)

▶ [李海洋](#)