

## 硫团簇 $S_n$ ( $n=2\sim 8$ )结构的朗之万分子动力学计算

白玉林; 陈向荣; 杨向东; 芦鹏飞

四川大学原子分子物理所, 成都 610065; 宜宾学院电信科技系, 宜宾 644000

### 摘要:

引入第一原理密度泛函理论, 即赝势密度泛函在实空间的有限差分方法和朗之万分子动力学退火技术, 对硫团簇 $S_n$  ( $n=2\sim 8$ )的结构等进行了计算. 结果表明,  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$ ,  $S_6$ ,  $S_7$ 和 $S_8$ 的结构对应为 $C_{2v}$ ,  $D_{2h}$ , 信封式 $C_s$ ,  $D_{3d}$  (或船式 $C_{2v}$ ), 椅式 $C_s$ 和 $D_{4d}$ 的对称结构, 其结构参数与有实验数据的 $S_2$ 和 $S_6-8$ 吻合较好. 从平均原子结合能看, 原子数目越多, 硫团簇越为稳定.

关键词: 赝势密度泛函 实空间 朗之万分子动力学退火技术 硫团簇

收稿日期 2003-05-18 修回日期 2003-07-21 网络版发布日期 2003-12-15

通讯作者: 陈向荣 Email: ybbaiyulin@163.com

### 本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(678KB)

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

▶ 赝势密度泛函

▶ 实空间

▶ 朗之万分子动力学退火技术

▶ 硫团簇

本文作者相关文章

▶ 白玉林

▶ 陈向荣

▶ 杨向东

▶ 芦鹏飞