

Pu₃M和PuM₃ (M=Ga, In, Sn, Ge)化合物的电子结构和形成热

罗文华; 蒙大桥; 李赣; 陈虎翅

表面物理与化学国家重点实验室, 四川 绵阳 621907

摘要:

采用全势线性缀加平面波(FPLAPW)方法, 在广义梯度近似(GGA)+自旋轨道耦合(SOC)+自旋极化(SP)下计算了具有AuCu₃构型的Pu₃M和PuM₃ (M=Ga, In, Sn, Ge)化合物的平衡结构、电子结构和形成热. 计算的晶格常数与实验值符合得很好; 态密度分析表明Pu 和M 原子轨道间的杂化作用决定于Pu 6d-Pu 5f、Mp-Pu 6d和Msp-M sp轨道杂化之间的竞争, 而这种竞争又依赖于M的含量; 电负性差和电子杂化效应是影响Pu₃M和PuM₃化合物形成热和稳定性的两个重要因素, 电负性差越大, M的s、p带中心距费米能级越远, Pu₃M(PuM₃)化合物的形成热越负, 稳定性越高.

关键词: 全势线性缀加平面波 Pu₃M和PuM₃化合物 电子结构 形成热

收稿日期 2007-07-16 修回日期 2007-11-24 网络版发布日期 2008-01-07

通讯作者: 罗文华 Email: luowenhua712@yahoo.com.cn

本刊中的类似文章

1. 李赣; 赖新春; 孙颖. FLAPW方法研究δ-钷单层表面几何和电子结构[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 686-689

扩展功能

本文信息

[PDF\(312KB\)](#)

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

▶ [全势线性缀加平面波](#)

▶ [Pu₃M和PuM₃化合物](#)

▶ [电子结构](#)

▶ [形成热](#)

本文作者相关文章

▶ [罗文华](#)

▶ [蒙大桥](#)

▶ [李赣](#)

▶ [陈虎翅](#)