

## $Al_mN_2$ ( $m=1\sim 8$ )团簇结构与稳定性的DFT研究

马文瑾; 武海顺

山西师范大学化学与材料科学学院, 临汾 041004

摘要:

用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法, 在6-31G\*水平上对 $Al_mN_2$  ( $m=1\sim 8$ ) 团簇的几何构型、电子结构、振动频率和热力学性质进行了理论研究. 结果表明,  $Al_mN_2$ 团簇的基态结构有两种基本构型,  $m\leq 2$ 的结构是以N-N键为核心周围与Al原子相配位形成的;  $m > 2$ 的结构是由两个 $Al_nN$  ( $n < m$ ) 分子碎片通过共用Al原子或Al-Al键相互结合形成的, 这为较快找到 $Al_mN_2$ 团簇基态结构提供了一条有效途径. 通过对基态结构能量二次差分的讨论, 得到了 $m$ 为偶数的 $Al_mN_2$ 团簇比 $m$ 为奇数的稳定.

关键词:  $Al_mN_2$ 团簇 密度泛函理论 结构与稳定性 基态

收稿日期 2003-09-25 修回日期 2003-11-28 网络版发布日期 2004-03-15

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@dns.sxtu.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(1579KB)

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

▶  $Al_mN_2$ 团簇

▶ 密度泛函理论

▶ 结构与稳定性

▶ 基态

本文作者相关文章

▶ 马文瑾

▶ 武海顺