

In_nNa 和 In_nNa^+ ($n=2-8$)的团簇结构和电子性质

罗小艳; 贾文红; 张聪杰

陕西师范大学化学与材料科学学院, 西安 710062

摘要:

在密度泛函理论B3LYP水平上, 对 In_nNa 和 In_nNa^+ ($n=2-8$)团簇进行了结构优化和振动频率计算. 计算结果表明, In_nNa ($n=2, 3, 4, 6$)最稳定结构中的对称性分别为 C_{2v} 、 C_{3v} 、 C_{4v} 和 C_{2v} , 而 In_nNa ($n=5, 7, 8$)的最稳定结构的对称性为 C_1 点群. 从 In_nNa ($n=4-8$)的最稳定结构可以看出, Na原子均位于四个In原子形成的四边形面上. 对于 In_nNa^+ ($n=2-8$), 除了 In_2Na^+ 、 In_4Na^+ 和 In_7Na^+ , 其它结构都与其中性结构相似. 进一步计算 In_nNa ($n=2-8$)团簇的平均结合能、能量的二阶差分以及绝热电离能表明, In_nNa ($n=2-8$)团簇能量的二阶差分呈现奇偶交替特征, In_4Na 和 In_6Na 较其它团簇更为稳定, 而且理论计算得到的绝热电离能和实验结果吻合得很好.

关键词: In_nNa 团簇 密度泛函理论 结构 稳定性

收稿日期 2008-09-16 修回日期 2008-10-22 网络版发布日期 2008-12-22

通讯作者: 张聪杰 Email: zcjwh@snnu.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(295KB)

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

▶ In_nNa 团簇

▶ 密度泛函理论

▶ 结构

▶ 稳定性

本文作者相关文章

▶ 罗小艳

▶ 贾文红

▶ 张聪杰