

## FMBen<sub>n</sub>(FM=Fe, Co, Ni; n=1-12)团簇结构和电子性质

葛桂贤 罗有华 张建玮

石河子大学师范学院物理系生态物理重点实验室, 新疆 石河子 832003; 华东理工大学理学院, 上海 200237; 北京大学物理学院, 北京 100871

摘要:

采用密度泛函理论中的广义梯度近似对FMBen(FM=Fe, Co, Ni; n=1-12)团簇的几何构型进行优化, 并对能量、频率和磁性进行了计算, 同时考虑了电子的自旋多重度. 结果表明, 纯钹团簇的幻数是由电子的壳层模型确定, 而FMBen团簇的幻数主要由几何效应来解释; 掺杂铁磁性的过渡金属(Fe, Co, Ni)提高了纯团簇的稳定性. 二阶能量差分表明FMBen(FM=Fe, Co, Ni)的幻数分别为5, 10; 5, 10; 4, 10. 通过对磁性质的研究发现掺杂不同的过渡金属时, 磁矩出现了不同的变化规律.

关键词: FMBen团簇 磁矩 电子性质

收稿日期 2008-04-07 修回日期 2008-05-20 网络版发布日期 2008-07-22

通讯作者: 葛桂贤 Email: geguixian@126.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(522KB\)](#)

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

▶ FMBen团簇

▶ 磁矩

▶ 电子性质

本文作者相关文章

▶ 葛桂贤

▶ 罗有华

▶ 张建玮