

引用信息: LIANG Yun-Xiao; SHUI Miao; LI Rong-Sheng. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(10): 1647-1651 [梁云霄;水淼;李榕生. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1647-1651]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究简报

硼/氮掺杂富勒烯C₂₀的结构和稳定性

梁云霄; 水淼; 李榕生

宁波大学材料科学与化学工程学院, 浙江 宁波 315211

摘要:

应用密度泛函理论(DFT)的B3LYP/6-31G*方法, 对C_{20-2n}X_{2n}(X=B, N; n=1、2、3、4)各异构体进行几何构型全优化和振动频率计算, 确定了基态结构, 对它们的取代方式、电子结构、张力和芳香性进行了研究. 氮掺杂不能显著降低分子的张力, C₁₂N₈的张力甚至比C₂₀的还要大, 极不稳定. C₁₈B₂的两个最稳定异构体1,14-C₁₈B₂和1,3-C₁₈B₂都有比较大的能隙和结合能, 具有很强的芳香性, 其张力与C₂₀的相比均显著降低. 1,14-C₁₈B₂和1,3-C₁₈B₂具有较高的稳定性, 可以用红外光谱区分这两个构型异构体.

关键词: 富勒烯C₂₀ 硼、氮掺杂 结构 稳定性 密度泛函理论

收稿日期 2007-03-14 修回日期 2007-05-18 网络版发布日期 2007-07-04

通讯作者: 梁云霄 Email: Liangyunxiao@nbu.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(309KB)

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

▶ 富勒烯C₂₀

▶ 硼、氮掺杂

▶ 结构

▶ 稳定性

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 梁云霄

▶ 水淼

▶ 李榕生