

研究论文

5d过渡金属原子中心镶嵌Ag团簇M@Ag<sub>12</sub> (M=Hf~Hg) Ih和Oh构型的密度泛函理论研究

龙娟 仇毅翔 王曙光\*

上海交通大学化学化工学院 上海 200240

收稿日期 2008-1-17 修回日期 2008-2-27 网络版发布日期 2008-8-15 接受日期 2008-3-10

摘要

采用相对论密度泛函理论方法对Ih和Oh构型M@Ag<sub>12</sub> (M=Hf~Hg)的几何和电子结构进行了系统的研究. 研究表明, 原子半径之和与团簇的电子结构共同决定了M—Ag键长的大小. M@Ag<sub>12</sub>的成键能来自中心原子的嵌入能和Ag<sub>12</sub>笼子的形变能. 最高占据轨道为成键轨道的团簇比反键轨道的团簇的稳定性强. 我们发现在此系列中, Ih构型不一定总比Oh构型稳定. Hf@Ag<sub>12</sub>, Ir@Ag<sub>12</sub>, Au@Ag<sub>12</sub>和Hg@Ag<sub>12</sub>的Oh构型比Ih构型稳定.

关键词

[密度泛函](#) [M@Ag<sub>12</sub>团簇](#) [Ih](#) [Oh](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王曙光 [sgwang@sjtu.edu.cn](mailto:sgwang@sjtu.edu.cn)

作者个人主页:

龙娟 仇毅翔 王曙光\*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (302KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[密度泛函” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

[龙娟 仇毅翔 王曙光\\*](#)