

金属态原子电负性的计算及应用(I)

王贵昌; 孙予罕; 钟炳

中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室, 太原 030001

摘要:

关键词: 电负性 金属态原子 屏蔽长度 电子脱出功 吸附热

收稿日期 1997-03-03 修回日期 1997-05-26 网络版发布日期 1998-01-15

通讯作者: 孙予罕 Email:

本刊中的类似文章

1. 张强; 张霞; 杨忠志. 环多肽晶体的浮动电荷极化力场模拟[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1243-1247
2. 杨捷; 唐作华; 吴德印; 李泽荣; 田安民; 鄢国森. 18-冠醚-6的构象研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1008-1013
3. 王贵昌; 孙予罕; 钟炳. 金属态原子电负性的计算及应用(II)[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 204-209
4. 赵良仲. 氧化物超导电性的经验判据[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 809-812
5. 刘述斌. 概念密度泛函理论及近来的一些进展[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 590-600
6. 周家驹; 谢桂荣; 谢前; 孙红梅; 冯军; 许志宏. 用于结构信息数值化的电负性拓扑指数方法[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 777-780
7. 余德才; 曹文娟; 余旭东. 原子核强度电势和原子价层电量对元素电负性的标度[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 155-160
8. 张贻亮; 李慎敏; 杨忠志. β -丙内酯的反应性分析[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 986-989
9. 喻典; 陈志达; 王繁; 李述周. 元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2001, 17(01): 15-22
10. 钱萍; 杨忠志. 应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇(H_2O)_n (n=11~16)的性质[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 561-568
11. 曹晨忠; 曾荣今. 原子电负性和极化度对卤代甲烷C 1s电子电离能的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1085-1089

扩展功能

本文信息

PDF(834KB)

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

▶ 电负性

▶ 金属态原子

▶ 屏蔽长度

▶ 电子脱出功

▶ 吸附热

本文作者相关文章

▶ 王贵昌

▶ 孙予罕

▶ 钟炳