

## V O<sup>q</sup>团簇按照 $\Delta=2v+q-5x$ 值进行分类

### Classification of V O<sup>q</sup> Clusters by $\Delta=2v+q-5x$

摘要点击 237 全文点击 89 投稿时间: 2011-8-29 采用时间: 2011-9-22

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/586-596

中文关键词 [钒氧化物](#) [基态构型](#) [密度泛函理论计算](#) [氧化指数](#) [成键性质](#)

英文关键词 [Vanadium oxide cluster](#) [Ground state structure](#) [Density functional calculation](#) [Oxidation index](#) [Bonding character](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
<a href="#">马艳平</a>	<a href="#">中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190; 中国科学院化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室, 北京100190</a>	
<a href="#">赵艳霞</a>	<a href="#">中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	
<a href="#">李子玉</a>	<a href="#">中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	
<a href="#">丁迅雷*</a>	<a href="#">中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	dingxl@iccas.ac.cn
<a href="#">何圣贵*</a>	<a href="#">中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京100190</a>	shengguihe@iccas.ac.cn

中文摘要

按照团簇的氧化指数, 对钒氧化物团簇 $V_xO_y^q$  ( $x \leq 8, q=0, \pm 1$ )进行了分类(钒氧化物的氧化指数 $\Delta=2y+q-5x$ ). 密度泛函理论计算结果表明, 氧化指数相同的团簇倾向于具有相似的成键方式、电子结构和反应活性. 根据这一规律, 提出了 $V_2O_6$ 和 $V_3O_6^+$ 新的可能的基态构型. 在钒氧化物体系上的成功应用, 表明这种分类方法可以有效地

英文摘要

Vanadium oxide clusters  $V_xO_y^q$  ( $x \leq 8, q=0, \pm 1$ ) are classified according to the oxidation index ( $\Delta=2y+q-5x$ ) of each cluster. Density functional calculations indicate that clusters with the same oxidation index tend to have similar bonding characters, electronic structures, and reactivities. This general rule leads to the findings of new possible ground state structures for  $V_2O_6$  and  $V_3O_6^+$  clusters. This successful application of the classification method on vanadium oxide clusters proves that this method is very effective in studying the bonding properties of early transition metal oxide clusters.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所  
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼  
联系电话: 0551-3601122 Email: [cjcp@ustc.edu.cn](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计