

## 镧系一氧化物LnO(Ln=La, Ce, Pr, Nd)的电子亲和能

### Electron Affinities of the Early Lanthanide Monoxide Molecules

摘要点击 377 全文点击 124 投稿时间: 2011-9-27 采用时间: 2011-10-9

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/604-610

中文关键词 [LaO](#) [CeO](#) [PrO](#) [NdO](#) [电子亲和能](#) [光电子成像](#) [密度泛函](#) [配位场理论](#)

英文关键词 [LaO](#) [CeO](#) [PrO](#) [NdO](#) [Electron affinity](#) [Photoelectron imaging](#) [Density functional calculation](#) [Ligand field theory](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
<a href="#">池超贤</a>	<a href="#">复旦大学化学系上海市分子催化和功能材料重点实验室, 上海200433</a>	
<a href="#">谢华</a>	<a href="#">中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连116023</a>	
<a href="#">从然</a>	<a href="#">中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连116023</a>	
<a href="#">唐紫超*</a>	<a href="#">中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连116023</a>	
<a href="#">周鸣飞*</a>	<a href="#">复旦大学化学系上海市分子催化和功能材料重点实验室, 上海200433</a>	<a href="mailto:mfzhou@fudan.edu.cn">mfzhou@fudan.edu.cn</a>

中文摘要

应用光电子成像技术研究了LaO<sup>-</sup>、CeO<sup>-</sup>、PrO<sup>-</sup>和NdO<sup>-</sup>。从1064 nm的振动分辨的光电子能谱得到LaO、CeO、PrO和NdO的电子亲和能分别为0.99(1)、1.00(1)、1.00(1)和1.01(1) eV。密度泛函计算和NBO分析显示镧系原子的4f电子趋于定域在4f轨道上, 不受分子电荷状态的影响。脱附的光电子主要来自镧系金属的6s轨道。配位英文摘要

The photoelectron imagings of LaO<sup>-</sup>, CeO<sup>-</sup>, PrO<sup>-</sup>, and NdO<sup>-</sup> at 1064 nm are reported. The well resolved photoelectron spectra allow the electron affinities to be determined as 0.99(1) eV for LaO, 1.00(1) eV for CeO, 1.00(1) eV for PrO, and 1.01(1) eV for NdO, respectively. Density functional calculations and natural atomic orbital analyses show that the 4f electrons tend to be localized and suffer little from the charge states of the molecules. The photodetached electron mainly originates from the 6s orbital of the metals. The ligand field theory with the  $\delta=2$  assumption is still an effective method to analyze the ground states of the neutral and anionic lanthanide monoxides.

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