

Cu原子掺杂在Al团簇中的结构和电子性质

Geometrical Structures and Electronic Properties of Copper-Doped Aluminum Clusters

摘要点击 27 全文点击 6 投稿时间: 2011-12-6 采用时间: 2012-3-4

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/02/169-176

中文关键词 [密度泛函理论](#) [电子性质](#) [Cu原子掺杂Al团簇](#)

英文关键词 [Density function theory](#) [electronic properties](#) [Cu doped Al clusters](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
成西会*	南京理工大学能源与动力工程学院, 南京210094; 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春130012	chxihui@yahoo.com.cn
丁大军*	吉林大学原子与分子物理研究所, 长春130012	dajund@jlu.edu.cn
余永刚	南京理工大学能源与动力工程学院, 南京210094	
金明星	吉林大学原子与分子物理研究所, 长春130012	

中文摘要

利用密度泛函理论, 对 Al_n ($n=1\sim 15$)团簇中掺杂Cu原子后的双金属团簇进行了研究, 在结构优化的基础上, 同时计算了双金属团簇的电子性质, 即电子亲和能、电离势、Cu原子的Mulliken分布、平均极化率、极化率的各向异性、偶极矩及HOMO-LUMO能隙随团簇尺寸增加时的变化情况. 结果表明, Cu掺杂Al团簇的双金属团簇中也存在幻数结构, 团簇的电子性质随团簇尺寸大小出现不规则的奇偶振荡变化. $n=13$ 的团簇电子亲和能和电离势与毗邻团簇相比, 其变化要大于0.3和0.6 eV.

英文摘要

Using density function theory (DFT), the Cu-doped Al_n ($n=1\sim 15$) clusters have been studied. The electron affinity, ionization potential, Mulliken population analysis of Cu, mean polarizability, polarizability anisotropy, dipole moments and HOMO-LUMO gaps have also been calculated on the basis of optimized geometries. The results indicate that there is magic numbers in copper-doped aluminum clusters and electronic characteristic depended on the size of clusters. As $n=13$, the electron affinity and ionization potential of cluster changed more than 0.3 and 0.6 eV respectively, compared with neighborhood 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

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计