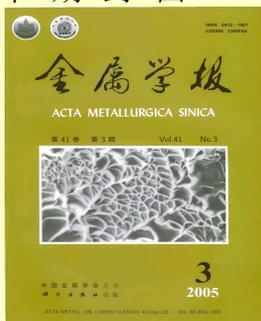


本期封面



2005年3期

栏目:

DOI:

论文题目: N_{in} ($n=2-6$) 原子簇的电子结构和磁性研究

作者姓名: 董建敏, 李华, 张昌文, 潘凤春, 王永娟, 甄鹏

工作单位: 山东大学物理与微电子学院, 济南 2501000

通信作者: 董建敏

通信作者Email: jmdong@sdu.edu.cn

文章摘要: 采用MS-X α 方法研究了 N_{in} ($n=2-6$) 原子簇的电子结构和原子磁矩, 发现团簇的几何对称性对原子磁矩和电子态密度的分布有重要影响. 具有 O_h 点群对称的八面体原子簇 Ni_6 的 $3E_g$ 轨道上存在很强的负交换耦合, 呈现反铁磁耦合趋势; 具有 C_{3v} 点群对称的三边金字塔结构的原子簇 Ni_5 位于塔顶点的Ni原子与基面上的Ni原子磁矩方向相反, 但大小不等, 呈现出亚铁磁交换耦合特征. 与金属Ni相比, 有些Ni原子团簇磁性增强, 有些团簇磁性减弱. 这一结果能够较好地解释铁磁超微颗粒呈现出的表面磁性异常现象.

关键词: N_{in} 原子团簇, 对称, 电子结构

分类号: 0562.1, 0482.52

关闭