

多体展开势能函数在碳族元素原子簇研究中的应用 III. 锗原子簇的结构和相对稳定性

李思殿

运城高等专科学校化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 基于从晶体锗确立的多体展开势能函数, 本文通过坐标完全优化, 发现小的锗原子簇分子(Ge₂~Ge₁₄) 倾向于形成密堆积结构, 表面原子分布以蝶形四元环(D_{2d})为主; 常见立方晶体“微观晶体碎片”的分层优化结果表明, 在Ge₁₅~Ge₁₀₀范围内, 多数壳层的原子到分子中心的距离均受到压缩, 且以畸变的简单立方、面心立方及体心立方较为稳定; 在这些畸变密堆积结构中, 表面原子向内压缩最为严重, 使整个分子趋于球形化。较为开放的金刚石类层状原子簇只有当所含原子数达数百以上时才可能相对更为稳定。

关键词 [稳定性](#) [表面结构](#) [锗](#) [原子簇](#) [势能函数](#) [山西省回国留学基金](#)

分类号 [0641](#)

Application of the many-body expansion potential energy functions to the study of group IV atomic microclusters. III. structures and stabilities of germanium microclusters

LI SIDIAN

Abstract A many-body expansion potential energy function parametrized to the properties of solid germanium is used to study the structures and stabilities of germanium microclusters. Close-packed structures are found for small clusters (Ge₂~Ge₁₄), consisting of exclusively four-membered butterfly rings. Shell optimization of the common cubic structures (diamond, s.c., bcc, and fcc) indicates that the distorted s.c., fcc, and bcc shell clusters with the out-most shells compressed most severely are more stable than diamond-type shell clusters and that diamond structures become more stable only for the clusters containing several hundreds of atoms.

Key words [STABILITY](#) [SURFACE STRUCTURE](#) [GERMANIUM](#) [POTENTIAL ENERGY FUNCTIONS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“稳定性” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [李思殿](#)