

C₂近邻环境对金属碳化物电子结构的影响

陈学安; 赵凌; 李言; 陈本明; 傅亨

中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

关键词: C₂近邻环境 金属碳化物簇 电子结构 DV-X_a

收稿日期 1995-07-26 修回日期 1995-10-10 网络版发布日期 1996-03-15

通讯作者: 陈学安 Email:

本刊中的类似文章

1. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(*N,N*-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 347-352
2. 史鸿运, 王一波, 邓洁, 张云黔, 张涛. 沙蚕毒系化合物的结构与生物活性关系[J]. 物理化学学报, 1995, 11(12): 1089-1092
3. 曹泽星, 黄宏新, 田安民. O₃⁻激发态电子结构及内部电荷转移理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 97-101
4. 胡云玩; 钱惠琴; 陈桥; 毛宏颖; 宋飞; 黄寒; 李海洋; 何丕模; 鲍世宁. Fluorescein有机薄膜在Ag(110)面上的生长研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 470-474
5. 崔万秋; 雷鸣. TiC、TiC_{1-x}、(Ti_{1-x}Nb_x)C电子结构的计算[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 198-203
6. 赵良仲; 刘芬; 张琳. LnCu₂O₄ (Ln=Gd, Nd)电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 310-313
7. 武晓君; 李群祥; 黄静; 杨金龙. 单分子器件电子输运性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 995-1002
8. 林梦海, 刘朝阳, 郑兰荪. 激光等离子体反应生成的AgP_n⁺、Au_mP_n⁺的结构分析[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 266-269
9. 殷元骐, 李文, 汪汉卿. 簇合物Co₆(μ₃-E)₈(CO)₆ (E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 151-156
10. 杨胜勇; 肖慎修; 陈天朗. (NiV₁₃O₃₈)⁷⁻的电子结构和催化性质的探讨[J]. 物理化学学报, 1994, 10(12): 1071-1074
11. 周传华; 李奇; 黄元河; 刘若庄. 聚噻吩取代效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 825-829
12. 李荣; 周上祺; 陈昌国; 梁国明; 刘守平; 孔纪兰. 钒氢化物电子结构的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(07): 716-720
13. 黄寒; 严欣激; 毛宏颖; 陈桥; 钱惠琴; 张建华; 李海洋; 何丕模; 鲍世宁. 银(110)表面花有序薄膜电子态的研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 892-896
14. 罗文华; 蒙大桥; 李赣; 陈虎翅. Pu₃M和PuM₃ (M=Ga, In, Sn, Ge)化合物的电子结构和形成热[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 388-392
15. 苗月; 袁宏宽; 陈洪. 双钙钛矿Sr_{2-x}La_xCrReO₆的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 448-452
16. 梁初; 黎光旭; 蓝志强; 刘奕新; 韦文楼; 郭进. LiAlH₄与Li₃AlH₆的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 686-690
17. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涵. CdO及Cd_xZn_{1-x}O化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1233-1238
18. 罗世霞; 张笑一; 张思亭; 朱淮武; 胡继伟; 卫钢. 巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1471-1476
19. 段玉华, 张开明, 伏羲路. CO和NO在CuO及Cu₂O(110)表面吸附选择规律研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(05): 407-413
20. 吕鑫, 徐昕, 王南钦, 张乾二. NO在NiO(100)面吸附的DV-X_a簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 796-800
21. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09):

扩展功能

本文信息

PDF(1156KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ C₂近邻环境
- ▶ 金属碳化物簇
- ▶ 电子结构
- ▶ DV-X_a

本文作者相关文章

- ▶ 陈学安
- ▶ 赵凌
- ▶ 李言
- ▶ 陈本明
- ▶ 傅亨

22. 吕海港;黎乐民.表观价态异常分子EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J].物理化学学报,1998,14(05):413-418
23. 胡亚兰;黄锋;蒋辉;范崇旭;陈常英;陈翼胜. σ -苄螺毒素构效关系与分子设计[J].物理化学学报,2005,21(05):474-478
24. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢.间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J].物理化学学报,2004,20(12):1476-1480
25. 陈琦丽 唐超群.N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO₂(101)表面电子结构的第一性原理计算[J].物理化学学报,2009,25(05):915-920
26. 张材荣;吴有智;陈玉红;陈宏善.有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质[J].物理化学学报,2009,25(01):53-60
27. 李葵英;郭静;刘通;周冰晶;李悦.掺镧多孔TiO₂纳米晶表面电子结构与能量转换机制[J].物理化学学报,2008,24(11):2096-2101
28. 李来才;王译伟;田安民.甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附[J].物理化学学报,2008,24(11):2013-2018
29. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎.有机-无机杂化化合物[Cu(μ -cbdca)(H₂O)]_n的电子结构及铁磁性[J].物理化学学报,2008,24(09):1681-1684
30. 张丽敏;范广涵;丁少锋.Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J].物理化学学报,2007,23(10):1498-1502
31. 欧阳方平;徐慧;李明君;肖金.Armchair型石墨纳米带的电子结构和输运性质[J].物理化学学报,2008,24(02):328-332
32. 胡海泉;李恒帅;崔守鑫;王文军.Fe/Cr超晶格的电子结构和磁性[J].物理化学学报,2007,23(06):846-850
33. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属烃配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2007,23(05):743-745
34. 张建华;庄友谊;吴悦;鲍世宁;刘凤琴;奎热西·易卜拉欣;钱海杰.己烯在Ru(1010)表面价带电子特性研究[J].物理化学学报,2002,18(05):437-440
35. 杨刚;龙翔云;杨高文;曾小君.二苯并四氮杂[14]轮烯金属配合物电子结构和性质 [J].物理化学学报,2002,18(02):100-105
36. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤.HBO₂异构体的结构和相对稳定性[J].物理化学学报,2002,18(01):87-90
37. 施申蕾;楼辉;张建华;吕萍;江宁;何丕模;鲍世宁.COT-H在金属Ru表面上沉积的光电子能谱分析[J].物理化学学报,2002,18(01):30-33
38. 吴卫东;张占文;罗江山;唐永建;郑永铭;陆晓明;赵鹏骥.Cu_xC₆₀薄膜紫外-可见吸收光谱研究[J].物理化学学报,2001,17(01):83-86
39. 陈常英;丁晓琴;冯珊.西加毒素(CTX)的电子结构及构效关系研究[J].物理化学学报,2000,16(04):307-311
40. 徐国亮.原子个数n对碳分子线C_n(n=3~10)基态结构特性的影响[J].物理化学学报,2006,22(06):701-705
41. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦.草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J].物理化学学报,1999,15(03):204-209
42. 李文;张瑞林;余瑞璜.Ti-Al系金属间化合物的价电子结构分析[J].物理化学学报,1999,15(09):824-829
43. 张琳;赵良仲;张金彪;徐翠英;刘世宏.BaKpBO和BaKpBiO的熔盐阳极电结晶[J].物理化学学报,1999,15(11):1049-1052
44. 邱丽美;刘芬;赵良仲.K-Pb-Tl-O复合氧化物的合成和电子结构的XPS研究 [J].物理化学学报,2002,18(07):633-635
45. 董南;朱龙观;吴念慈.La(NO₃)₃·bipy·2H₂O·(B-15-C-5)电子结构和电化学键[J].物理化学学报,1993,9(02):252-255
46. 黎乐民.[Nd(SSCNH₂)₄]⁻的电子结构 一种有机硫配位镧系络合物的模型阴离子[J].物理化学学报,1992,8(01):10-17
47. 李丽;吴锋;陈实;陈人杰 .LaNi_{5-x}Cox合金电子结构的第一性原理分析[J].物理化学学报,2006,22(11):1331-1336
48. 倪敏;贺黎明;金乾元;刘洪霖.非晶态Co-B的局域电子结构的X₀原子簇计算[J].物理化学学报,1992,8(04):550-554
49. 刘光华;黎乐民;徐光宪;梁珍璇.五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J].物理化学学报,1991,7(01):64-71
50. 叶元杰.蛋白质的电子结构与活性关系——理论与计算方法[J].物理化学学报,1991,7(03):257-259
51. 陈学安;傅亨;唐有祺;朱敏慧;徐江.结构调制对Bi₂Sr₂CuO₆电子结构的影响[J].物理化学学报,1991,7(04):396-399
52. 贾建峰;武海顺.BN纳米管内含C纳米管——结构与电学性质[J].物理化学学报,2006,22(12):1520-1525

53. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂 $K_4Ce_2Ta_{10}O_{30}$ 、 $K_4Ce_2Nb_{10}O_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472

54. 张子英, 杨德林, 刘云虎, 曹海滨, 邵建新, 井群. $BaTiO_3$ 的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
