

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

(GaN)<sub>n</sub> (n=2~10) 系列团簇最低能量结构的研究

李恩玲, 祁伟, 李小平, 朱红, 杨春燕, 王进宇

西安理工大学理学院, 西安 710048

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法在6-31G\*水平上, 对(GaN)<sub>n</sub> (n=2~10)系列团簇的结构进行优化, 并对体系的成键特性、光电子能谱及极化率进行了计算与分析, 得到了(GaN)<sub>n</sub> (n=2~10)团簇的最稳定结构. 结果表明, 在所研究的团簇中, Ga<sub>5</sub>N<sub>5</sub>, Ga<sub>9</sub>N<sub>9</sub>的基态结构最稳定. 当n≤5时, 其基态几何结构大多为平面结构; N—N键在这些团簇的形成过程中起决定性的作用. 当n≥6时, 其基态几何结构为立体结构; 团簇中存在大量Ga—N键并构成多元环结构, 说明随着原子数的增多, 由Ga和N组成的环形结构起决定性作用.

关键词: 团簇; 密度泛函理论; 几何结构; 光电子能谱; 极化率

Study of Lowest Energy Structure About (GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) Clusters

LI En-Ling\*, QI Wei, LI Xiao-Ping, ZHU Hong, YANG Chun-Yan, WANG Jin-Yu

School of Science, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China

Abstract:

Geometric structure and relative stability of(GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) clusters were studied with the density functional-theory with 6-31G\* basis sets of B3LYP. The geometric structures of ground state of (GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) clusters were obtained. The bond properties, photoelectron energy spectroscopy and polarizability of the isomers of (GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) clusters were calculated and analyzed. The results show that among the (GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) clusters, Ga<sub>5</sub>N<sub>5</sub>, Ga<sub>9</sub>N<sub>9</sub> are more stable. The most structures of optimized (GaN)<sub>n</sub> (n≤5) clusters are planar structure, and N—N bonds play a crucial role in stabilizing cluster. When n>6, the structures of optimized (GaN)<sub>n</sub> (n=2—10) clusters are spacial structure. The Clusters exist in a large number of Ga—N bonds and form multi-ring structure, the ring structures of Ga and N play an important role with the increase of the number of total atoms.

Keywords: Cluster; Density functional theory; Geometry structure; Photoelectron energy spectroscopy; Polarizability

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

西安市应用材料创新基金(批准号: XA-AM-200212); 西安市应用发展研究计划项目(批准号: YF07064); 西安理工大学博士启动基金(批准号: 108-210904)资助.

通讯作者: 李恩玲, 女, 博士, 教授, 主要从事纳米半导体材料的制备与模拟. E-mail: lienling@xant.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1]Zhao W. J., Yan Y. L., Yang Z., et al.. J. At. Mol. Phys.[J], 2007, 24: 716
- [2]Lei X. L., Yan Y. L., Ge G. X., et al.. J. At. Mol. Phys.[J], 2007, 24: 1003
- [3]Wang B. L., Zhao J. J., Shi D., et al.. Phys. Rev. A[J], 2005, 72: 023204
- [4]Guo L., Wu H. S., Jin Z. H.. J. At. Mol. Phys.[J], 2004, 21: 335
- [5]Li E. L., Chen G. C., Wang X. W., et al.. J. At. Mol. Phys.[J], 2006, 23: 279
- [6]Costales A., Kandalam A. K., Pandey R.. J. Phys. Chem. B[J], 2003, 107(19): 4508—4514
- [7]Costales A., Pandev R.. J. Phys. Chem. A[J], 2003, 107(1): 191—197
- [8]Song B., Cao P. L.. Phys. Lett. A[J], 2004, 328(4): 364—374

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (539KB)

[HTML全文]

[\({article.html| WenJianDaXiao} KB\)](#)

参考文献[PDF]

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

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

团簇; 密度泛函理论; 几何结构; 光电子能谱; 极化率

本文作者相关文章

PubMed

- [9]Kandalam A. K., Pandey R., Blanco M. A., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2000, 104(18): 4361—4367  
[10]Kandalam A. K., Blanco M. A., Pandey R.. J. Phys. Chem. B[J], 2001, 105(26): 6080—6084  
[11]Kandalam A. K., Blanco M. A., Pandey R.. J. Phys. Chem. B[J], 2002, 106(8): 1945—1953  
[12]Li E. L., Wang X. W., Chen G. C., et al.. Acta. Phys. Sin.[J], 2006, 55(5): 2249—2256  
[13]Ge G. X., Lei X. L., Yan Y. L., et al.. J. At. Mol. Phys.[J], 2008, 25(1): 143—148  
[14]Li E. L., Wang X. W., Chen G. C., et al.. J. At. Mol. Phys.[J], 2006, 23(2): 279—282  
[15]Li E. L., Wang X. W., Chen G. C.. Acta Phys. Sin.[J], 2006, 55(5): 2249—2256  
[16]Li E. L., Ma H., Chen G. C., et al.. CJCP[J], 2007, 24(4): 480—486

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 2048