

研究论文

Al_mN_2 和 Al_mN_2^+ ($m=1\sim 8$)团簇结构与稳定性的量子化学研究

马文瑾, 武海顺*

(山西师范大学化学与材料科学学院 临汾 041004)

收稿日期 2004-11-4 修回日期 2005-3-24 网络版发布日期 接受日期

摘要 用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法,在6-311G*水平上对 Al_mN_2 和 Al_mN_2^+ ($m=1\sim 8$)团簇的几何构型、电子结构、振动频率和分子轨道进行了理论研究.结果表明, Al_mN_2 类团簇的基态结构有两种基本构型,一种是以N—N键为核心周围与Al原子相配位形成的,一种是由两个 Al_nN ($n\leq m/2$)分子碎片通过共用Al原子或Al—Al键相互结合形成的.对 Al_nN 分子碎片相互结合形成结构的绝热电离能讨论得到, m 为偶数的团簇比 m 为奇数的稳定.

关键词 [Al_mN₂和Al_mN₂[±]团簇](#) [密度泛函理论](#) [结构](#) [稳定性](#) [基态](#)

分类号

Quantum Chemical Study on Structure and Stability of Al_mN_2 and Al_mN_2^+ ($m=1\sim 8$)

Clusters

MA Wen-Jin, WU Hai-Shun*

(School of Chemistry and Material Science, Shanxi Normal University, Linfen 041004)

Abstract The geometric configurations, electronic structures, vibrational frequency and molecular orbital of the Al_mN_2 and Al_mN_2^+ ($m=1\sim 8$) clusters were studied using the B3LYP DFT method at 6-311G* level. The results show that there exist two types of bonding character in the ground state of Al_mN_2 clusters. One is formed through N—N bonds and aluminum atom, and the other is combined with Al_nN ($n\leq m/2$) fragments in virtue of Al or Al—Al bond. The combined structures with Al_nN fragments with even m are more stable than those with odd m from the analysis of the ionization energy.

Key words [Al_mN₂ and Al_mN₂[±] cluster](#) [density functional theory](#) [structure](#) [stability](#) [ground state](#)

DOI:

通讯作者 武海顺 wuhs@dns.sxtu.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(402KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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 “Al_mN₂和Al_mN₂[±]团簇” 的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- [马文瑾](#)
- [武海顺](#)