

硅硫团簇 $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+(n=1\sim 4)}$ 的结构及振动光谱的量子化学研究

王素凡,封继康,刘建军,孙家钟,刘鹏,高振,孔繁敖

吉林大学理论化学研究所.长春(130023);吉林大学理论化学计算国家重点实验室;中国科学院化学研究所.北京(100080);中国科学院分子反应动力学国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用密度泛函(DFT)方法(B3LYP/6-31G\*)研究了硅硫团簇 $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+(n=1\sim 4)}$ 的可能几何构型,得到各稳定构型的电子结构,并计算了相应的振动频率,预测了稳定构型的振动光谱。由其稳定构型的比较可在理论上预测团簇的生长规律,并可初步预测团簇的形成机理。

**关键词** [原子簇](#) [硅化合物](#) [硫化物](#) [电子结构](#) [振动光谱](#)

分类号 [0641](#)

## Quantum chemical study of silicon-sulfur clusters $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+(n=1\sim 4)}$

Wang Sufan,Feng Jikang,Liu Jianjun,Sun Jiazhong,Liu Peng,Gao Zhen,Kong Fanao

Jilin Univ, Inst Theoret Chem.Changchun(130023);Inst of Chem, CAS. Beijing(100080)

**Abstract** The possible geometrical structures and relative stability of silicon-sulfur clusters  $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+(n=1\sim 4)}$  are explored by means of density functional theory (DFT) quantum chemical calculations (B3LYP/6-31G\*). The effects of polarization functions and electron correlation are included in these calculations. The electronic structure and vibrational spectrum of the most stable geometrical structure of  $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+}$  are analyzed by the same method. As the result, the regularity of the  $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+}$  cluster growing is predicted, and the calculation may predict the mechanism of the  $[(\text{SiS}\sim 2)\sim n\text{S}]^{+}$  cluster forming.

**Key words** [SILICON COMPOUNDS](#) [SULFUR COMPOUNDS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [VIBRATIONAL SPECTRUM](#)

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“原子簇”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王素凡](#)
- [封继康](#)
- [刘建军](#)
- [孙家钟](#)
- [刘鹏](#)
- [高振](#)
- [孔繁敖](#)