

二十面体对称性(I-h)分子的从头计算研究II. 铜原子簇Cu~13的电子结构

张明瑜,于微舟,李晓天,江元生

吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 应用对称性约化计算方案,完成了铜原子簇Cu~13(I-h)三种基组下的从头计算,最大维数390。为了进行比较,也进行了Cu~2、Cu~4、Cu~6及Cu~8的计算。经过优化,获得基态及平衡几何、布居、结合能等数据,表明Cu~13可能稳定存在。Cu~13中以d成分为主的分子轨道均已填满,对化学键无实际贡献,成键作用为s, p性质;再者, d带与s带不相交叠,无金属Cu能带的特征。无论平衡几何、布居及结合能数值均与采用的其组很有关系,虽然定性趋势是一致的。

关键词 [铜](#) [电子结构](#) [从头算法](#) [原子](#) [正二十面体](#) [基态](#) [布局](#) [结合能](#) [约化理论](#) [键长](#) [簇手性分子](#)

分类号 [0641](#)

Ab initio studies on icosahedral molecules II. The electronic structure of Cu~13

ZHANG MINGYU, YU WEIZHOU, LI XIAOTIAN, JIANG YUANSHENG

Abstract Ab initio calcns. were made for Cu clusters Cu_n with $n = 2, 4, 6, 8$ and 13. The basic sets as well as bonding parameters, total energies and binding energies were given. The configurations of S, P, and d orbitals of Cu13 clusters are given, and showed that Cu13 does not have the metallic band characteristics.

Key words [COPPER](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [ATOM](#) [ICOSAHEDRON](#) [GROUND STATE](#) [DISPOSITION](#) [BINDING ENERGY](#) [REDUCTION THEORY](#) [BOND LENGTH](#) [VARIETY](#)

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“铜”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [张明瑜](#)
- [于微舟](#)
- [李晓天](#)
- [江元生](#)