

## 研究论文

### 三方硒电子结构的EH研究

崔长星; 江元生

吉林大学理论化学研究所

#### 摘要:

计算了三螺旋硒链的一维能带, 三方硒的三维能带和Se<sub>6</sub>簇的能级。能带分为三组: Se-Se成键带, 孤对电子带和Se-Se反键带。符合Se-Se, 成键的价电子层结构。同时对电子态进行了空间群的对称性分类。为了更广泛的将固体的计算结果与原子簇做比较, 定义了簇轨道重叠布居, 它是原子簇计算态密度的轨道重叠布居权重值。计算表明, Se<sub>6</sub>簇(D<sub>3d</sub>)的态密度和簇轨道重叠布居分别与三方硒的态密度和晶体轨道重叠布居颇为类似, 说明两者成键本质的类似性。带隙和态密度与相应的实验数据作了比较。

#### 关键词:

收稿日期 1986-06-09 修回日期 1986-11-25 网络版发布日期 1987-12-15

通讯作者: 江元生 Email:

#### 本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(2061KB)

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

本文作者相关文章

▶ 崔长星

▶ 江元生