

引用信息: Li Quan; Liu Xiao-Ya; Gao Tao; Zhu Zheng-He; Fu Yi-Bei; Wang Xiao-Lin; Sun Ying. Acta Phys. -Chim. Sin., 2000, 16(11): 987-991 [李权; 刘晓亚; 高涛; 朱正和; 傅依备; 汪小琳; 孙颖. 物理化学学报, 2000, 16(11): 987-991]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

PuOⁿ⁺的势能函数的稳定性

李权; 刘晓亚; 高涛; 朱正和; 傅依备; 汪小琳; 孙颖

四川大学学院与分子物理所 成都 610065; 四川师范大学化学系 成都 610066; 西南核物理与化学研究所 成都 610003

摘要:

用密度泛函B3LYP方法对PuO_n⁺ (n=1, 2, 3) 分子离子进行了理论研究, 结果表明, PuO⁺、PuO₂⁺分子离子能稳定存在, 电子状态是X₆Σ⁻(PuO⁺)、X₅Σ⁻(PuO₂⁺)、9Σ⁻(PuO₂⁺)、7Σ⁻(PuO₂⁺). 导出了相应的几何性质、力学性质和光谱数据, PuO₃⁺分子离子不能稳定存在。

关键词: PuOⁿ⁺ 分子离子 势能函数 稳定性 密度泛函理论(DFT)

收稿日期 2000-02-22 修回日期 2000-05-15 网络版发布日期 2000-11-15

通讯作者: 李权 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1319KB)

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

▶ PuOⁿ⁺

▶ 分子离子

▶ 势能函数

▶ 稳定性

▶ 密度泛函理论(DFT)

本文作者相关文章

▶ 李权

▶ 刘晓亚

▶ 高涛

▶ 朱正和

▶ 傅依备

▶ 汪小琳

▶ 孙颖