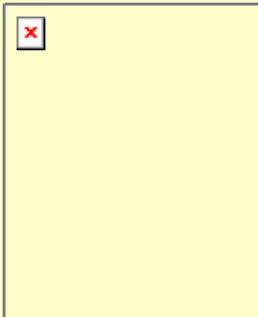


本期封面



2001年4期

栏目:

DOI:

论文题目: REBa₂Cu₃O₇的化学键性质和Mossbauer谱研究

作者姓名: 高发明 李东春 张思远

工作单位: 燕山大学材料化工学院, 秦皇岛066004

通信作者: 高发明

通信作者Email: clxy@ysu.edu.cn

文章摘要: 利用电介质的平均能带模型计算了REBa₂Cu₃O₇ (RE=Eu, Y) 的化学键参数, 得到Cu(1)-O键的平均共价性为0.41, Cu(2)-O键的平均共价性为0.28. 应用由共价性和极化率定义的化学环境因子计算了⁵⁷Fe和¹¹⁹Sn在REBa₂Cu₃O₇中的Mossbauer同质异能位移, 确定了⁵⁷Fe在EuBa₂Cu₃O₇和¹¹⁹Sn在YBa₂Cu₃O₇中的价态和占位情况.

关键词: 超导体, REBa₂Cu₃O₇, 化学键

分类号: 0641.13, 04814

关闭