

$(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 系列团簇 最低能量结构的研究

李恩玲, 祁伟, 李小平, 朱红, 杨春燕, 王进宇
(西安理工大学理学院, 西安 710048)

摘要 采用密度泛函理论(DFT)的 B3LYP 方法在 6-31G* 水平上, 对 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 系列团簇的结构进行优化, 并对体系的成键特性、光电子能谱及极化率进行了计算与分析, 得到了 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 团簇的最稳定结构. 结果表明, 在所研究的团簇中, Ga_5N_5 , Ga_9N_9 的基态结构最稳定. 当 $n \leq 5$ 时, 其基态几何结构大多为平面结构; N—N 键在这些团簇的形成过程中起决定性的作用. 当 $n \geq 6$ 时, 其基态几何结构为立体结构; 团簇中存在大量 Ga—N 键并构成多元环结构, 说明随着原子数的增多, 由 Ga 和 N 组成的环形结构起决定性作用.

关键词 团簇; 密度泛函理论; 几何结构; 光电子能谱; 极化率

中图分类号 O641

文献标识码 A

文章编号 0251-0790(2009)S0-0077-06

团簇广泛存在于自然界中, 其涉及许多过程和现象, 构成物理学和化学两大学科的一个交汇点, 成为材料学一个新的生长点. 近十几年来, 原子团簇的结构和稳定性得到了广泛的研究^[1,2].

近几年来, III-V 族化合物半导体材料奇特的光学性质和潜在的应用价值已在物理、化学和材料等领域引起广泛兴趣, 也使得 III-V 族化合物团簇成为团簇领域的研究热点之一^[3-5]. Costales 等^[6,7] 利用密度泛函理论研究了 Ga_nN_2 ($n = 4 \sim 6$) 中性及阴离子团簇的 N—N 键演变趋势. Song 等^[8] 利用 Linear-muffin-tin-orbital 分子动力学的方法计算研究了 Ga_nN_m ($n + m \leq 8$) 团簇的几何与电子结构. Kandalam 等^[9-11] 在密度泛函理论(DFT)的基础上运用非局域密度近似的方法计算了 Ga_nN_m ($n, m = 1 \sim 2$) 和 Ga_nN_n ($n = 3 \sim 6$) 的团簇结构. BelBrtno^[12] 用 DFT 研究了 Ga_nN_n ($n = 2 \sim 4$) 的结构. 葛桂贤等^[13] 在密度泛函理论(DFT)的基础上计算了 Ga_nN_n ($n = 2 \sim 5$) 的团簇结构. 我们利用 DFT 对 Ga_nN ($n = 2 \sim 8$) 和 Ga_nN_2 ($n = 1 \sim 7$)^[14-16] 中性及阴阳离子团簇的结构及稳定性进行了研究. 而至今对 $(\text{GaN})_n$ ($n = 7 \sim 10$) 团簇的研究尚未见报道.

本文利用 B3LYP/6-31G* 密度泛函方法对 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 系列团簇进行研究, 对 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 系列团簇的结构进行优化, 得到了 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 团簇的最稳定结构, 同时对体系的成键特性、热力学性质、光电子能谱及极化率进行了研究.

1 计算方法

采用密度泛函理论(DFT)中的 B3LYP 方法在 6-31G* 水平上对 $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 的各种可能构型进行了优化. 为了兼顾时间和精度, 首先在 HF/STO-3G 低基组上对所设计的团簇结构进行优化, 最后在 B3LYP/6-31G* 高基组的水平上, 寻找到多维势能面的最小点, 并在相同的水平上, 对稳定构型的零点能、热熔、熵、光电子能谱、团簇能量、能隙、极化率进行了计算. 所有的计算均在 Dell 工作站上采用 Gaussian 03 程序完成的.

本文仅列出团簇的最低能量结构(基态结构), 并对其讨论.

收稿日期: 2009-07-28.

基金项目: 西安市应用材料创新基金(批准号: XA-AM-200212); 西安市应用发展研究计划项目(批准号: YF07064); 西安理工大学博士启动基金(批准号: 108-210904)资助.

联系人简介: 李恩玲, 女, 博士, 教授, 主要从事纳米半导体材料的制备与模拟. E-mail: lienling@xant.edu.cn

2 结果与讨论

2.1 几何结构

$(\text{GaN})_n$ ($n=2\sim 10$) 团簇的最低能量结构(基态结构)如图 1 所示. 图 1 中灰色和黑色小球分别表示 Ga 原子和 N 原子. (原子间距分别小于 0.3330 nm (Ga—Ga), 0.2432 nm (Ga—N), 0.1591 nm (N—N) 时成键. Ga_2N_2 的基态结构是具有 C_1 对称的平面结构. 其中, N—N 为双键键长为 0.1168 nm ; Ga—Ga 键长为 0.3024 nm ; 而 Ga—N 键长分别为 0.2376 和 0.2155 nm . 团簇中存在 N—N 键. 该结果与葛桂贤等对 Ga_2N_2 的计算结果一致.

Ga_3N_3 的基态结构是具有 C_1 对称的平面结构. 其中, N_3 单元中 N—N—N 的键长分别是 0.129 、 0.1319 nm ; Ga—N 键的键长在 0.195 到 0.2189 nm 之间. 团簇中存在 N_3 单元. 该结果与葛桂贤等^[13] 对 Ga_3N_3 的计算结果一致.

Ga_4N_4 的基态结构是具有 C_1 对称的立体结构. 其中可以看成是一个 Ga_4N 单元和一个 N_3 单元构成. N_3 单元中 N—N—N 的键长分别是 0.1199 、 0.1176 nm ; Ga_4N 单元中 Ga—N 键的键长均为 0.20649 nm . 团簇中存在 N_3 单元. 该结果也与葛桂贤等^[13] 对 Ga_4N_4 的计算结果不同, 本文尝试与其最低能量构型一致进行计算, 结果得到的团簇能量要高于本文所得构型, 故本文列出的构型较优.

Ga_5N_5 的基态结构是具有 C_s 对称的平面结构. 其中可以看成是一个 Ga_5N_2 单元和一个 N_3 单元构成. N_3 单元中 N—N—N 的键长分别是 0.1221 、 0.1146 nm ; Ga_5N_2 单元中 Ga—N 的键长为 $0.1833\sim 0.1983\text{ nm}$; 连接 2 个单元的 Ga—N 键的键长为 0.1952 nm . 团簇中存在 N_3 单元. 该结果与葛桂贤等对 Ga_5N_5 的计算结果基本吻合.

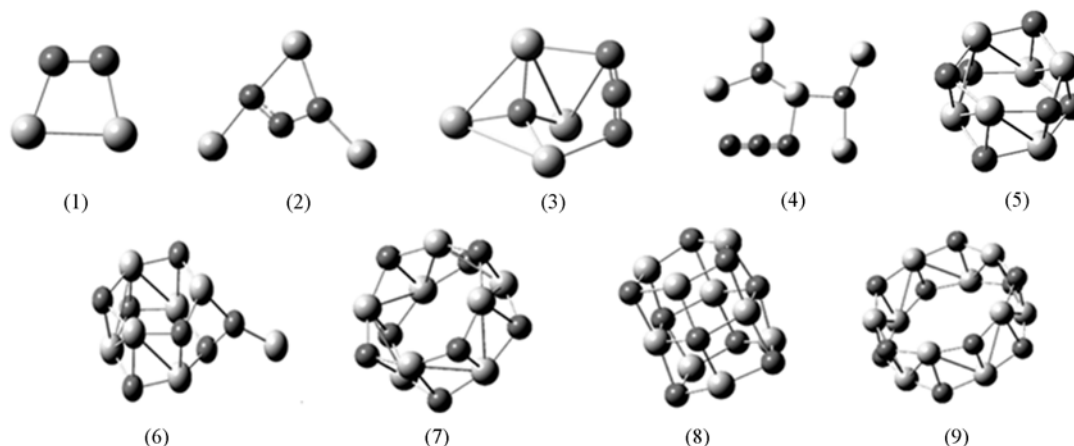


Fig. 1 Geometric structures of $(\text{GaN})_n$ ($n=2\sim 10$) clusters

Ga_6N_6 的基态结构是具有 C_{2h} 对称的立体结构. 从图 1(5) 可以看出, Ga_6N_6 的几何结构是由 2 个六元环连接形成, 其中六元环中的 Ga—N 键的键长相等且为 0.1900 nm . 连接六元环的 Ga—N 键的键长为 0.2003 nm . Ga_7N_7 的基态结构是具有 C_1 对称的立体结构. 从图 1(6) 中可以看出 Ga_7N_7 的几何结构是由一个 2 个六元环组成的环状单元加一个 GaN 单元组成的, 其中六元环中 Ga—N 键的键长为 0.1890 nm 到 0.1920 nm . 而且可以看出靠近 GaN 单元的键长长些, 而离 GaN 单元最远的 2 个 Ga—N 键的键长等于 0.1900 nm 等于 Ga_6N_6 的几何结构六元环中的 Ga—N 键的键长. GaN 单元中 Ga—N 键的键长为 0.1902 nm .

Ga_8N_8 的基态结构是具有 C_1 对称的立体结构. 从图 1(7) 可以看出 Ga_8N_8 的几何结构是由 2 个八元环组成, 其中八元环上的 Ga—N 键的键长为: 0.1864 nm 连接八元环的 Ga—N 键的键长为 0.2030 nm .

Ga_9N_9 的基态结构是具有 C_{2v} 对称的立体结构. 从图 1(8) 中可以看出 Ga_9N_9 的几何结构是由 3 个六元环连接构成, 其中六元环上的 Ga—N 键的键长为 0.1917 nm , 连接六元环的 Ga—N 键的键长为 0.2003 nm .

Ga₁₀N₁₀的基态结构是具有 C_{2h}对称的立体结构. 从图1(9)中可以看出 Ga₁₀N₁₀的几何结构是有2个十元环组成, 其中十元环上的 Ga—N 键的键长为 0.1847 nm, 连接十元环的 Ga—N 键的键长为 0.2036 nm.

综上所述, (1) 可以从(GaN)_n (n=2~5)的基态结构中得到, 在团簇中都含有 N₂ 和 N₃ 结构, 这是由于 John Teller 效应, N₂ 和 N₃ 的存在降低了结构对称性使得简并能级分裂从而降低总能量. 说明在 n 较小时, N—N 在团簇形成过程中起决定性作用. 且在 n 较小时形成的团簇多数为平面结构. (2) 我们可以从(GaN)_n (n=6~10)的基态结构中看出, 当团簇的原子数目增加时, John Teller 效应的效果降低. (GaN)_n (n=6~10)中性团簇基态结构由多元环组成. (GaN)_n (n=6 和 n=9)的基态结构都是由六元环连接构成, 并且在六元环上 Ga—N 键的键长都约等于 0.1900 nm. (GaN)_n n=7 的基态结构也主要由六元环构成, 环上的 Ga—N 键的键长不相等是由于2个六元环单元与(GaN)单元连接受到力作用而发生变形造成的, 且远离(GaN)单元的 Ga—N 键长仍然等于 0.1900 nm. (GaN)_n (n=8, n=10)团簇的基态结构中多元环上的 Ga—N 键的键长基本相等; 连接多元环的 Ga—N 键的键长也相差不大.

由上可以推断, (GaN)_n 中性团簇由多元环连接构成的结构稳定性比较高, 如 Ga₁₂N₁₂的基态结构很有可能为4个六元环或3个八元环构成. 如果假设成立那么当 n 继续增加(GaN)_n 中性团簇很有可能由多元环连接而成的线形结构.

2.2 热力学性质与光电子能谱

表1列出了(GaN)_n (n=2~10)团簇基态的零点能、热容、熵及谐振频率. 从表1可以看出, 随着 n 值的增大, 零点能、热容的数值均逐渐增大, 当 n 每增大一个单位, 零点能平均增加幅度约为 12.44 kJ/mol, 热容平均增加 31.88 J·mol⁻¹·K⁻¹, 而熵没有一直增加而是在中间有所回落, 但总趋势是随着 n 的增大在增大.

Table 1 Zero-point energies, thermal capacity, standard entropy and harmonic vibrational frequencies of (GaN)_n (n=2—10) clusters

Cluster	Zero energy/ (kJ·mol ⁻¹)	Thermal capacity/ (J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹)	Standard entropy/ (J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹)	Minimum frequency/cm ⁻¹ [IR intensities/(km·mol ⁻¹)]	Maximum frequency/cm ⁻¹ [IR intensities/(km·mol ⁻¹)]
Ga ₂ N ₂	17.68	62.47	334.19	106.97(A)[0.4]	1853.59(A)[241.0]
Ga ₃ N ₃	32.91	94.12	403.84	50.77(A)[0.9]	1308.11(A)[120.1]
Ga ₄ N ₄	45.58	137.55	475.46	36.62(A)[1.2]	2094.29(A)[689.4]
Ga ₅ N ₅	61.43	170.75	568.21	13.73(A)[0.1]	2246.73(A)[886.4]
Ga ₆ N ₆	75.68	200.37	468.46	128.61(AG)[1.0]	737.98(AU)[0.2]
Ga ₇ N ₇	86.74	239.69	553.49	31.06(A)[0.1]	883.40(A)[194.3]
Ga ₈ N ₈	102.55	274.18	589.17	48.37(A)[1.0]	846.29(A)[0.1]
Ga ₉ N ₉	119.99	307.19	579.57	121.51(B1)[0.4]	788.48(B2)[227.4]
Ga ₁₀ N ₁₀	129.64	349.40	697.97	32.08(AG)[1.0]	912.10(AU)[0.3]

表1还给出了(GaN)_n (n=2~10)团簇基态结构的光电子最大及最小谐振频率, 小括号内是相应的振动模式, 中括号内是相应的红外强度. 其中最小的振动频率反映所得结构是否为虚频, 从表1中可知所有谐振频率均为正值, 表明各结构均为势能面上的极小点, 保证其能量的二阶导数矩阵的本征值为正值, 说明相应的结构均为稳定结构.

纤锌矿结构 GaN 的光学声子模式 (T=300 K) 为: A₁(TO)=533 cm⁻¹, E₁(TO)=559 cm⁻¹, A₁(LO)=710 cm⁻¹, E₁(LO)=741 cm⁻¹, E₂=569 cm⁻¹或 E₂=145 cm⁻¹. 闪锌矿结构 GaN 的光学声子模式 (T=300 K) 为: 740 cm⁻¹, 403 cm⁻¹.

图2给出了(GaN)_n (n=2~10)团簇基态结构的吸收峰的位置. 其中 Ga₂N₂, Ga₃N₃, Ga₄N₄ 团簇中都在 400 cm⁻¹位置出现吸收峰, 所以这些团簇中存在与闪锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近的 Ga—N 键. Ga₂N₂, Ga₃N₃, Ga₄N₄, Ga₅N₅ 团簇中都出现了大于 1000 cm⁻¹的吸收峰, 而 n>5 就再未出现过, 我们认为这些是团簇中的 N₂, N₃ 单元的吸收峰. Ga₃N₃, Ga₅N₅, Ga₆N₆, Ga₇N₇, Ga₈N₈, Ga₉N₉, Ga₁₀N₁₀ 团簇都在 550 cm⁻¹附近出现了吸收峰, Ga₅N₅, Ga₆N₆, Ga₇N₇, Ga₉N₉ 团簇在 700 cm⁻¹附近出现

了吸收峰, 所以这些团簇中存在与纤锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近的 Ga—N 键. 由图 2 还可以看出, Ga_6N_6 的吸收峰在 Ga_9N_9 , Ga_7N_7 中都有出现, 这证明了前面的分析结果, 即 Ga_6N_6 , Ga_7N_7 和 Ga_9N_9 团簇中 Ga—N 键的相似性. Ga_8N_8 和 $\text{Ga}_{10}\text{N}_{10}$ 团簇都在大于 800 cm^{-1} 出现了吸收峰, 我们认为是键长超过 0.2 nm 的 Ga—N 键的吸收峰或者是 Ga—Ga 键的吸收峰, 同时也证明了 Ga_8N_8 和 $\text{Ga}_{10}\text{N}_{10}$ 团簇中化学键的相似性.

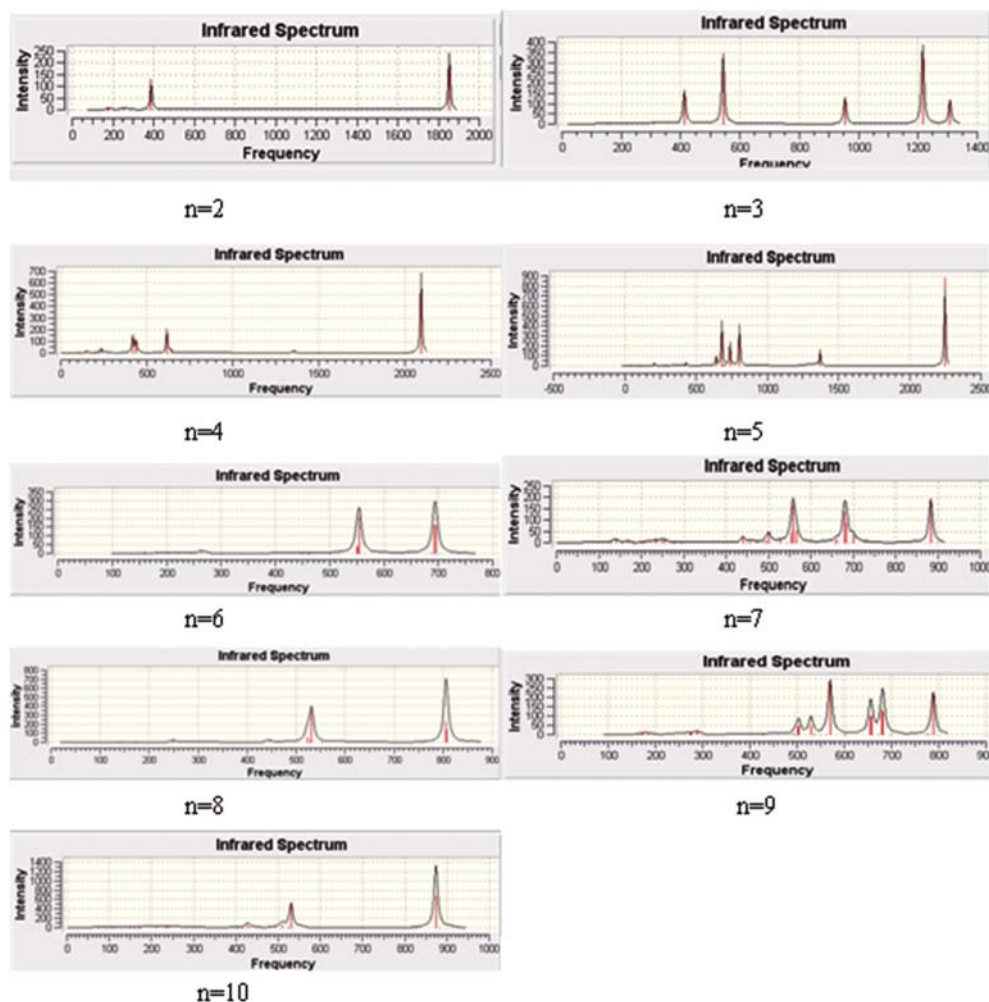


Fig. 2 Vibrational frequencies and IR intensities of possible ground states of $(\text{GaN})_n$ ($n=2-10$)

综上, 当 $n \leq 5$ 时, 团簇中存在 N_2 和 N_3 单元, 而且这些团簇中的 Ga—N 键有些和纤锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近, 有些和闪锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近; 随着 n 的增大, 团簇中 Ga—N 和纤锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近, 也进一步表明计算结果的正确性及所用理论的合理性. 同时在实验室制备 GaN 薄膜的过程中, 都可能产生先驱中间化合物—团簇, 因此本文计算的振动频率可以作为未来在实验上表征相应分子的依据.

2.3 能量二次差分及极化率

为了进一步验证 $(\text{GaN})_n$ ($n=2 \sim 10$) 团簇基态的稳定性, 我们由下式计算了 $(\text{GaN})_n$ ($n=2 \sim 10$) 团簇的相邻团簇的能量二次差分, 团簇的能量二次差分随 n 的变化如图 3 所示.

$$\Delta^2 E_n = E_{\text{Ga}_{n+1}\text{N}_{n+1}} + E_{\text{Ga}_{n-1}\text{N}_{n-1}} - 2E_{\text{Ga}_n\text{N}_n}$$

表 2 给出了 $(\text{GaN})_n$ ($n=2 \sim 10$) 团簇的总能量、

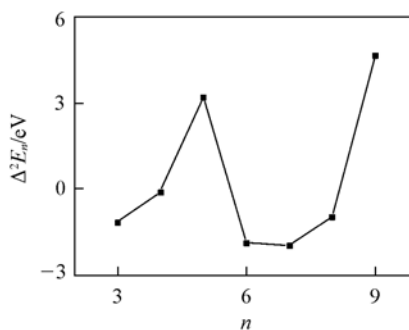


Fig. 3 Second difference in energy of cluster

团簇结合能、原子平均结合能、能隙和能量的二次差分值. 我们知道, 许多团簇都有幻数效应, 原子数等于幻数的团簇相对稳定, 因为其平均原子结合能明显大于非幻数团簇的平均原子结合能. 我们推测 Ga_nN_n 团簇在随 *n* 增大时也有“幻数”效应, *n* = 5, 9 可能是 Ga_nN_n 团簇的幻数. 对比二次差分图 3 的局域最大值, 同样可以得出 *n* = 5, 9 是可靠的幻数, 这说明 Ga₅N₅, Ga₉N₉ 团簇较稳定. (GaN)_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的能隙间隔在 1.7056 ~ 3.5484 eV 之间, 表明其具有半导体的性质.

Table 2 Total energies, binding energies, HOMO-LUMO gap and the second difference in energy of possible ground states of (GaN)_n (n=2–10) clusters

Cluster	Total energy/eV	Cluster binding energy/eV	Average binding energy/eV	HOMO-LUMO gap/eV	The second difference in energy/eV
Ga ₂ N ₂	-107631.27	21.4090	10.7045	1.7813	
Ga ₃ N ₃	-161447.72	32.9289	10.9763	3.0121	-1.2
Ga ₄ N ₄	-215265.37	45.6537	11.4134	3.5484	-0.13
Ga ₅ N ₅	-269083.15	58.4782	11.6956	3.2474	3.22
Ga ₆ N ₆	-322897.71	68.1369	11.3562	1.7886	-1.9
Ga ₇ N ₇	-376714.17	79.6683	11.3812	1.7056	-2.0
Ga ₈ N ₈	-430532.63	93.1967	11.6496	2.4191	-0.98
Ga ₉ N ₉	-484352.07	107.7078	11.9675	2.1465	4.69
Ga ₁₀ N ₁₀	-538166.82	117.5231	11.7523	2.7682	

同时还对 (GaN)_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的极化率进行了计算, 并且由式 (1), (2) 计算得到了极化率张量的平均值 $\langle \alpha \rangle$ 、极化率的各相异性不变量 $\Delta \alpha$ 和每个原子的平均线性极化率 $\langle \alpha \rangle / n$.

$$\langle \alpha \rangle = (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) / 3 \quad (1)$$

$$\Delta \alpha = \left[\frac{(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2}{2} \right]^{1/2} \quad (2)$$

从表 3 可以看出, 极化率张量的平均值整体呈增加趋势, 表明团簇非线性光学性质能力随原子数目增加而增强. 单位原子的平均极化率整体上呈下降的趋势, 表明团簇的电子结构随着原子数目的增加略显紧凑, 团簇 (GaN)_n (*n* = 6, 8, 9, 10) 的单位原子平均极化率变化不大, 主要因为其结构是由多元环组成, 多元环中的 Ga—N 键长差距不大, 导致它们的电子结构比较接近.

Table 3 Polarizability tensor (α_{ij}), polarizability ($\langle \alpha \rangle$), static mean polarizabilities ($\langle \alpha \rangle / n$) and polarizability anisotropies ($\Delta \alpha$) of Ga_nN_n (n=2–10) clusters

Cluster	α_{xx}	α_{yy}	α_{zz}	α_{xy}	α_{yz}	α_{zx}	$\langle \alpha \rangle$	$\langle \alpha \rangle / n$	$\Delta \alpha$
Ga ₂ N ₂	143.23	3.67	82.15	0.07	-0.21	59.22	94.87	23.72	75.21
Ga ₃ N ₃	176.64	5.72	153.25	-0.07	0.02	92.75	140.88	23.48	74.98
Ga ₄ N ₄	162.44	-2.47	170.61	-0.08	0.25	144.57	159.205	19.90	23.06
Ga ₅ N ₅	273.44	17.13	44.74	0.31	0.11	129.35	215.84	21.58	132.10
Ga ₆ N ₆	159.20	0.76	181.82	0.00	0.00	181.35	174.12	14.51	22.38
Ga ₇ N ₇	341.69	-0.01	208.81	-2.38	-0.01	192.53	247.68	17.69	141.72
Ga ₈ N ₈	248.24	0.02	248.28	0.00	0.00	196.55	231.02	14.44	51.69
Ga ₉ N ₉	239.10	0.00	286.70	0.00	0.00	239.49	255.10	14.17	47.61
Ga ₁₀ N ₁₀	262.97	39.99	306.17	0.00	0.00	329.99	299.71	14.99	58.85

3 结 论

本文用密度泛函理论对 (GaN)_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的几何构型、体系的成键特性、热力学性质、光电子能谱、能量二次差分及极化率进行了研究, 最终得到了 (GaN)_n (*n* = 2 ~ 10) 的基态结构. 结果表明:

(1) 当 *n* ≤ 5 时, 其基态几何结构多数为平面结构, 在稳定结构中, 都存在着 N₂ 和 N₃ 单元; 当 *n* ≥ 6 时, 其基态几何结构为立体结构, 存在大量 Ga—N 键, 说明随着原子数的增多, Ga—N 键更容易成键, 并且基态均由多元环连接构成.

(2) 通过分析光电子能谱得到了振动频率. 当 *n* < 6 时, 团簇中存在 N₂, N₃ 单元, 而且 Ga—N 键有些和纤锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近, 有些和闪锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近. 当

随着 n 的增大, 团簇中 Ga—N 键和纤锌矿结构 GaN 中的一些 Ga—N 键相近.

(3) 通过二阶能量差分曲线图发现, $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 团簇在 $n = 5, 9$ 具有较高的稳定性, 即 Ga_5N_5 , Ga_9N_9 的基态结构最稳定. $(\text{GaN})_n$ ($n = 2 \sim 10$) 团簇的能隙在 1.7056 ~ 3.5484 eV 之间, 表明这些团簇具有半导体的性质.

参 考 文 献

- [1] Zhao W. J., Yan Y. L., Yang Z., *et al.*. J. At. Mol. Phys. [J], 2007, **24**: 716
- [2] Lei X. L., Yan Y. L., Ge G. X., *et al.*. J. At. Mol. Phys. [J], 2007, **24**: 1003
- [3] Wang B. L., Zhao J. J., Shi D., *et al.*. Phys. Rev. A[J], 2005, **72**: 023204
- [4] Guo L., Wu H. S., Jin Z. H. J. At. Mol. Phys. [J], 2004, **21**: 335
- [5] Li E. L., Chen G. C., Wang X. W., *et al.*. J. At. Mol. Phys. [J], 2006, **23**: 279
- [6] Costales A., Kandalam A. K., Pandey R. J. Phys. Chem. B[J], 2003, **107**(19): 4508—4514
- [7] Costales A., Pandey R. J. Phys. Chem. A[J], 2003, **107**(1): 191—197
- [8] Song B., Cao P. L. Phys. Lett. A[J], 2004, **328**(4): 364—374
- [9] Kandalam A. K., Pandey R., Blanco M. A., *et al.*. J. Phys. Chem. B[J], 2000, **104**(18): 4361—4367
- [10] Kandalam A. K., Blanco M. A., Pandey R. J. Phys. Chem. B[J], 2001, **105**(26): 6080—6084
- [11] Kandalam A. K., Blanco M. A., Pandey R. J. Phys. Chem. B[J], 2002, **106**(8): 1945—1953
- [12] Li E. L., Wang X. W., Chen G. C., *et al.*. Acta. Phys. Sin. [J], 2006, **55**(5): 2249—2256
- [13] Ge G. X., Lei X. L., Yan Y. L., *et al.*. J. At. Mol. Phys. [J], 2008, **25**(1): 143—148
- [14] Li E. L., Wang X. W., Chen G. C., *et al.*. J. At. Mol. Phys. [J], 2006, **23**(2): 279—282
- [15] Li E. L., Wang X. W., Chen G. C. Acta Phys. Sin. [J], 2006, **55**(5): 2249—2256
- [16] Li E. L., Ma H., Chen G. C., *et al.*. CJCP[J], 2007, **24**(4): 480—486

Study of Lowest Energy Structure About $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) Clusters

LI En-Ling*, QI Wei, LI Xiao-Ping, ZHU Hong, YANG Chun-Yan, WANG Jin-Yu
(School of Science, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract Geometric structure and relative stability of $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) clusters were studied with the density functional-theory with 6-31G* basis sets of B3LYP. The geometric structures of ground state of $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) clusters were obtained. The bond properties, photoelectron energy spectroscopy and polarizability of the isomers of $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) clusters were calculated and analyzed. The results show that among the $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) clusters, Ga_5N_5 , Ga_9N_9 are more stable. The most structures of optimized $(\text{GaN})_n$ ($n \leq 5$) clusters are planar structure, and N—N bonds play a crucial role in stabilizing cluster. When $n > 6$, the structures of optimized $(\text{GaN})_n$ ($n = 2—10$) clusters are spacial structure. The Clusters exist in a large number of Ga—N bonds and form multi-ring structure, the ring structures of Ga and N play an important role with the increase of the number of total atoms.

Keywords Cluster; Density functional theory; Geometry structure; Photoelectron energy spectroscopy; Polarizability