第一图书网, tushu007.com

<<二元合金小团簇的结构和稳定性>>

图书基本信息

书名：<<二元合金小团簇的结构和稳定性>>

13位ISBN编号：9787811290837

10位ISBN编号：7811290839

出版时间：2008-8

出版时间：黑龙江大学出版社有限责任公司

作者：刘凤丽

页数：146

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：http://www.tushu007.com

内容概要

本书在分子轨道从头算框架下，采用Hartree-Fock（HF）、二阶微扰论（MP2）、耦合簇（CCSD（T））和密度泛函（DFT）B3LYP理论等方法以及相对论和非相对论的有效核实赝势模型（ECP），对贵金属Cu、Ag和Au与金属AI、TI二元合金小团簇（MnX）n（M=Cu，Ag，Au；X=Al，TI；n=1，2）和AgnX（n=1-6；X=AI，TI）的结构和稳定性进行了系统的理论研究。

作者简介

刘凤丽，1968年7月出生，黑龙江富锦市人，黑龙江大学硕士生导师。
1991年毕业于哈尔滨师范大学物理系，2004年获得哈尔滨师范大学凝聚态物理专业硕士学位，2007年取得哈尔滨工业大学博士学位，目前在四川大学原子与分子物理研究所做博士后工作。
硕士期间从事非线性下反铁磁薄膜的磁光性质研究工作，博士期间从事混合团簇相互作用的理论研究，取得了良好的研究成果。
在国内外期刊上发表文章20余篇，其中多篇被SCI检索。

书籍目录

第1章 绪论 1.1 团簇的基本知识 1.1.1 团簇的定义 1.1.2 团簇的分类及形状 1.1.3 团簇的主要性质 1.1.4 团簇的理论模型 1.1.5 团簇研究的意义 1.2 团簇物理研究进展 1.3 分子结构与势能函数 1.4 本书研究背景第2章 理论基础和计算方法 2.1 量子化学理论基础 2.1.1 分子体系的Schrodinger方程 2.1.2 近似理论 2.1.3 变分原理 2.1.4 基函数 2.2 电子相关问题 2.2.1 电子相关的物理图象 2.2.2 电子相关能 2.2.3 微扰理论方法 2.2.4 组态相互作用 2.2.5 耦合簇方法 2.2. 6密度泛函理论 2.3 赝势方法第3章 MX（M=Cu，Ag，Au；X=Al，Ga，In，Tl）分子结构与势能函数 3.1 双原子分子Mx（M=Cu，Ag，Au；x=A1，Ga，In，T1）的结构和稳定性 3.1.1 所用的计算方法和基组 3.1.2 MX（M=Au，Ag，Cu；X=Al，Ga，In，Tl）分子的结构和稳定性 3.1.3 电子相关效应和相对论效应 3.2 双原子分子的势能函数及其性质 3.2.1 双原子分子势能函数的性质 3.2.2 双原子分子势能函数形式 3.3 MX（M=Au，Ag，Cu；X=Al，Ga，In，Tl）分子的势能函数和光谱数据 3.3.1 MX（M=Au，Ag，Cu；X=Al，Ga，In，Tl）分子的电子状态与离解极限 3.3.2 MX（M=Au，Ag，Cu；X=Al，Ga，In，Tl）分子的分析势能函数、力常数和光谱数据第4章 M2x2（M=Cu，Ag，Au；X=Al，T1）二元合金小团簇的ab initio研究 4.1 M2Al2（M=Cu，Ag，Au）二元合金小团簇的ab initio研究 4.1.1 研究M：A1：（M：cu，Ag，Au）团簇采用的计算方法和基组 4.1.2 M2Al2（M=Cu，Ag，Au）团簇的几何构型和稳定性 4.1.3 电子相关效应和相对论效应 4.2 M2Tl2（M=Cu，Ag，Au）二元合金小团簇的ab initio研究 4.2.1 M2Tl2（M=Cu，Ag，Au）团簇采用的计算方法和基组 4.2.2 M2Tl2（M=Cu，Ag，Au）团簇的几何构型和稳定性 4.2.3 电子相关效应第5章 AgnX（X=Al，Tl；n=1～6）二元合金小团簇的密度泛函研究 5.1 AgnAl（n=1～6）二元合金小团簇的结构号眭质的密度泛函理论研究 5.1.1 研究AgnAl（n=1～6）团簇采用的计算方法和基组 5.1.2 AgnAl（n=1～6）团簇的平衡几何结构 5.1.3 AgnAl（n=1～6）团簇的稳定性 5.1.4 AgnAl（n=1～6）团簇的电离势 5.1.5 AgnAl（n=1～6）团簇的电子亲和能 5.1.6 AgnAl（n=1～6）团簇的能级分布 5.1.7 AgnAl（n=1～6）团簇的自然布居分析 5.2 AgnTl（n=1～6）二元合金小团簇的结构与性质的密度泛函理论研究 5.2.1 研究AgnTl（n=1～6）团簇采用的计算方法和基组 5.2.2 AgnAl（n=1～6）团簇的平衡几何结构 5.2.3 AgnAl（n=1～6）团簇的稳定性 5.2.4 AgnAl（n=1～6）团簇的电离势 5.2.5 AgnAl（n=1～6）团簇的电子亲和能 5.2.6 AgnAl（n=1～6）团簇的能级分布 5.2.7 AgnAl（n=1～6）团簇的自然布居分析参考文献

章节摘录

第1章 绪论　　1.1.2 团簇的分类及形状　　团簇的分类有多种不同的方法。
根据团簇中原子键合的类型和强度，大致可以将团簇分为：分子团簇、范德瓦尔斯团簇、金属键团簇、共价键团簇、离子键团簇和氢键团簇等；根据团簇的结构和性质随着它本身尺寸变化趋势不同，可以大致把团簇分为：小尺寸团簇、中等尺寸团簇和大尺寸团簇。
这样划分的依据是：小尺寸团簇的结构和性质的尺寸效应剧烈，中等尺寸团簇的结构基本上按照确定的模式发展，团簇性质随尺寸变化比较缓慢，但是尺寸效应仍然比较明显，而大尺寸团簇已经基本具备了体材料的某些性质和特点，尺寸效应仍然存在但是不太明显；根据团簇中元素的组分可分为单元团簇和混合／掺杂团簇。
混合／掺杂团簇（mixed／dopedc1uster）是由若干个两种或两种以上的原子、分子或离子以物理或化学结合力组成的相对稳定的聚集体，它的性质依赖于组分的特性和尺寸的大小。
　　由于成键的不饱和性和没有方向性，以及开壳层电子结构的普遍存在，团簇具有特殊的成键规则和结构规律。
到目前为止，还有许多团簇的结构尚不清楚，已知的有线状、层状、管状、洋葱状、骨架状和球状等等。
　　1.1.3　团簇的主要性质　　（1）团簇的稳定性和幻数　　在团簇的质谱分析中，人们发现含有某些特殊原子个数n的团簇的强度呈现峰值，这些峰值表明，具有这些原子数目的团簇的频率最高、最稳定，这些特殊的原子个数n称为幻数。
稀有气体呈现出典型的幻数特征，如Echt等人发现Xe。
离子团簇的幻数n为：13、19、25、55、71、87、147等处。
除此之外，人们对碱金属和贵金属的幻数也进行了广泛的研究。
如：1i、Na、K团簇的幻数n为：2、8、（18）、20、（34）、40、58、92……；Ag团簇。
的幻数n为：2、8、18、20、34、40和58等。
其它金属，如IIB、IIA和IIIA族等元素构成团簇的质量丰度谱也呈现幻数结构。
　　团簇幻数的研究是一个很复杂的问题，其具体值一方面取决于团簇的本征特性，另一方面依赖于制备条件。
但是团簇幻数的存在确实是团簇的一个重要的物理特征。
　　（2）团簇的基态结构　　多数团簇只能在极端条件下的气相微量瞬时存在，无法得到其宏观量样品。
目前尚无法测定自由团簇的红外、紫外、核磁等波谱性质，因而在绝大多数情况下难以从实验上获取其几何结构和电子结构信息。
而团簇的稳定结构（包括局域稳定结构和全局最低能量结构，即基态结构）是研究各种团簇性质的基础，因此团簇的稳定结构是团簇研究中关注的首要问题，而有关团簇及其离子稳定结构的信息迄今仍主要来源于理论的计算。
　　（3）电离能和电子亲和能　　团簇的电离能，一般指第一电离能，可分为垂直电离能和绝热电离能。
电子亲和能，一般指第一电子亲和能，可分为垂直电子亲和能和绝热电子亲和能，都能反映团簇的几何和电子构型的重要信息。
电离能和电子亲和能在实验上主要是通过光离化能阈值测定和光电子能谱来测定的，理论上也可以进行计算。
理论值和实验值的吻合程度，特别是变化趋势及特征峰位的一致性，反映理论模型的正确程度。
　　……

第一图书网, tushu007.com

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:http://www.tushu007.com