

# 关于 $Al_n C$ 和 $Al_n C^+$ ( $n = 1-8$ ) 团簇结构和稳定性的研究\*

冯选旗<sup>1)</sup> 冯雪红<sup>2)</sup> 姜振益<sup>3)†</sup>

1) (西北大学物理学系, 西安 710069)

2) (西安交通大学理学院, 西安 710049)

3) (西北大学现代物理研究所, 西安 710069)

(2009 年 11 月 19 日收到; 2009 年 12 月 18 日收到修改稿)

通过采用 7 种密度泛函理论 DFT 方法对  $Al_n C$  进行计算, 所得结果与实验数据比较, 选择了 B3lyp 方法和 6-311G(d) 基组对  $Al_n C$  及  $Al_n C^+$  ( $n = 1-8$ ) 团簇进行结构优化和频率分析, 得到了  $Al_n C$  及  $Al_n C^+$  基态以及亚稳态结构. 当  $n$  从小到大变化时, 这些团簇的结构从平面向立体过渡, 平面构型以三角形为主, 立体构型主要是三棱柱笼状结构; 在这些团簇中的高对称性结构中, 中性团簇和阳离子只能有其一为稳定构型; 在所研究的团簇中,  $Al_2 C$  和  $Al_5 C$  团簇较为稳定.

**关键词:**  $Al_n C$  团簇, 密度泛函理论 (DFT), 几何结构

**PACC:** 3640B, 3640C, 7115M

## 1. 引 言

铝碳合金材料的高强度、质轻等众多优点, 在材料科学和天文化学方面处于相当重要的地位, 这让其在各类高级产品中崭露头角, 将是未来材料的主角<sup>[1,2]</sup>. 铝碳团簇在基础科学和纳米技术领域引起更多的关注. 近年来, 有许多实验和理论研究致力于铝碳团簇的结构、光谱、稳定性、离子势等方面的研究.

实验方面主要将铝和碳粉末混合物通过脉冲激光轰击浓缩从而形成铝碳团簇<sup>[3-5]</sup>, 利用飞行质谱和光电子 (PE) 光谱学揭示了铝碳团簇重要的结构信息<sup>[3-15]</sup>, 理论研究主要采用从头计算和密度泛函方法<sup>[5-18]</sup>, 采用的方法有 MP2<sup>[10,17]</sup>, CASSCF<sup>[5]</sup>, CCSD (T)<sup>[5,8-11]</sup>, OVGF<sup>[9,11]</sup>, B3LYP<sup>[8,10-13]</sup> 等. Boldyrev 和 Wang 等人针对  $Al_n C$  ( $n = 2-5$ ) 及其阴离子,  $Al_n C_2^-$  ( $n = 2-3$ ),  $Al_{12} C^-$  等团簇, 将光电子光谱学和从头算 (ab initio) 原理有效地结合对团簇的构型及稳定性等进行了讨论, 对铝碳团簇进行了开创性的研究<sup>[8-14]</sup>. Leskiw 和 Ashman 等人分别从实验和计算对  $Al_n C$  ( $n = 1-8$ ) 团簇及其阴离子进行了研究, 取得了单碳多铝团簇比较系统化的结构数

据<sup>[15,16]</sup>. Naumkin F Y 对用 MP2 算法对  $C_m Al_n$  及阴离子 ( $n = 2-3, m = 2-8$ ) 进行了计算, 获得了双碳及三碳多铝团簇的结构数据<sup>[17]</sup>.

金属团簇的物理化学特性决定于团簇的组分 (包括基本组分及其他掺杂金属元素与非金属元素)、几何结构、量子尺寸、表面-体积比率等特性, 所以研究不同组分的铝碳团簇的结构、稳定性、演化过程等对于许多实际应用如催化、新型纳米材料、分子仪器等有重要的价值和意义<sup>[17-19]</sup>.  $Al_n C$  团簇可以认为是一个  $Al_n$  团簇与一个碳原子的结合. 根据从头计算结果表明:  $Al_n$  团簇在  $n \leq 5$  时表现为平面结构, 而当  $n > 5$  时, 转化为立体结构<sup>[20]</sup>.

本文中, 我们采用 DFT 方法对  $Al_n C$  团簇和阳离子进行计算, 对于中性团簇  $Al_n C$  ( $n = 1-8$ ) 进行了系统性计算, 发现了一些新的稳定构型, 对文献中结构差异较大的团簇 (如文献 [10] 和 [16] 中  $Al_4 C$ ) 的基态结构进行了印证, 并给出了相应的物理解释; 对于阳离子  $Al_n C^+$  ( $n = 1-8$ ) 计算获得了相应的基态及稳定激发态构型, 发现多数阳离子的基态构型与中性团簇差别较大, 如  $Al_n C$  ( $n = 2, 4, 5, 6, 7$ ); 对铝碳团簇的对称性、构型特征、成型过程等进行了分析和讨论.

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2009CB626611), 国家自然科学基金 (批准号: 10974152) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jiangzy@nwu.edu.cn

## 2. 计算方法

本文使用 Gaussian03 程序应用密度泛函理论 (DFT), 通过寻找势能面上的极小点对 AIC 团簇结构进行优化, 并对振动频率进行计算, 获得稳定结构. DFT 在团簇计算比较流行的方法中, 我们选择了其中 7 种, 包括局域自旋密度近似 (LSDA) 的 Swn 方法 (Slater 交换泛函与 VWN 相关泛函的组合), 广义梯度近似 (GGA) 的 Bp86, Bpw91 和 Pw91pw91 方法, 杂化广义梯度近似 (hybrid-GGA) 的 B3lyp, B3p86 和 B3pw91 方法. 在 DFT 计算中, 对于我们要计算的 Al 和 C 原子, 选择三重分裂 d 轨道极化基组 6-311G(d), 能够给出比较精确的结果. 为了获得更准确的计算结果, 我们将这 7 种计算方

法与实验数据比较, 选择一种最优化的 DFT 方法对  $Al_nC$  团簇进行计算和研究.

如表 1 所示, 列出了 AIC 键长的实验数据和 7 种不同 DFT 算法对 AIC 四重态键长的计算结果及其与实验数据 0.1955 nm 的相对偏差, 表 2 列出了二重态 AIC 离解能 7 种 DFT 算法的计算值及其与实验值 1.98 eV 的相对误差, 表 3 列出了三重态正离子  $AIC^+$  离解能 7 种 DFT 算法的计算值及其与实验值 0.59 eV 的相对误差, 通过比较发现自旋非限制密度泛函 B3lyp 计算结果与实验相符程度最好. 所以针对  $Al_nC$  和  $Al_nC^+$  ( $n=1-8$ ) 的计算均采用 B3lyp/6-311G(d) 方法, 通过振动频率计算, 对称多维势能面对其结构进行了优化, 通过寻找势能面上的极小点, 获得  $Al_nC$  团簇的稳定构型.

表 1 四重态 AIC 键长 7 种算法的计算值及与实验值相对误差

算法	Swn	Bp86	Bpw91	Pw91pw91	B3pw91	B3p86	B3lyp
键长/nm	0.195426	0.198276	0.198274	0.197849	0.197195	0.196741	0.197475
误差/%	-0.038	1.420	1.420	1.202	0.867	0.635	1.010

表 2 二重态 AIC 电离能 7 种算法的计算值及与实验值相对误差

算法	Swn	Bp86	Bpw91	Pw91pw91	B3pw91	B3p86	B3lyp
离解能/eV	3.54287	3.14287	3.0748	3.19729	2.11702	2.22586	2.02178
误差/%	78.933	58.731	55.295	61.479	6.92	12.417	2.11

表 3 三重态正离子电离能 7 种算法的计算值及与实验值相对误差

算法	Swn	Bp86	Bpw91	Pw91pw91	B3pw91	B3p86	B3lyp
离解能/eV	1.47756	1.03946	1.04218	1.14558	0.84354	0.86259	0.61769
误差/%	150.433	76.18	76.641	94.167	42.973	46.201	4.693

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 团簇的结构

通过 B3lyp/6-311G(d) 方法对  $Al_nC$  ( $n=1-8$ ) 团簇和其阳离子进行了系统计算, 为了获得更

精确的结果, 我们计算了大量的初始猜测构型计算, 同时也对不同的自旋态进行计算, 图 1—图 4 列出了  $Al_nC$  团簇及阳离子  $n=1-8$  计算结果. 在以下的计算结果中, 针对不同的  $n$  我们将最低能量构型标为基态, 对于不同的  $n$  基态能量由表 4 给出, 对于亚稳态构型我们给出的是相对于基态的能量差.

表 4  $Al_nC$  及  $Al_nC^+$  基态能量、电离能

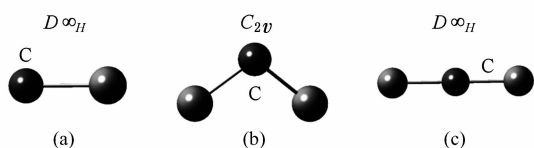
N	基态能量/eV		电离能/eV	n	基态能量/eV		电离能/eV
	中性	阳离子			中性	阳离子	
1	7628.95	7620.27	8.68	5	34022.07	34015.92	6.15
2	14227.20	14220.63	7.04	6	40619.87	40613.69	6.18
3	20826.86	20820.13	6.73	7	47217.96	47211.66	6.29
4	27425.03	274180.00	7.03	8	53825.91	53809357	6.35

表5  $Al_nC$  及  $Al_nC^+$  基态结构集合参数

团簇	态	键长/nm	团簇	态	键长/nm	团簇	态	键长/nm
$AlC$	4	0.1975	$Al_6C^+$	2	1—2 0.3062	$Al_8C$	1	1—2 0.2992
$AlC^+$	3	0.1977			2—3 0.2746			1—4 0.2951
$Al_2C$	3	0.1868			2—5 0.2005			2—3 0.2770
$Al_2C^+$	4	0.2040			2—6 0.2699			2—4 0.2716
$Al_3C$	2	1—2 0.1975			3—4 0.2780			2—5 0.2086
		1—3 0.1871			3—5 0.1935			2—6 0.2661
$Al_3C^+$	3	0.1905			3—7 0.2938			4—5 0.2041
$Al_4C$	1	0.2009	$Al_7C$	2	1—2 0.2652			4—9 0.2660
$Al_4C^+$	2	1—2 0.2825			1—3 0.2699			5—6 0.2183
		2—3 0.1910			1—4 0.2084			5—8 0.2196
		3—4 0.1883			1—5 0.2709			5—9 0.2173
$Al_5C$	2	1—2 0.2920			2—6 0.2684			6—8 0.2667
		2—3 0.2731			2—7 0.2603			6—9 0.2601
		2—4 0.1984			3—4 0.2088	$Al_8C^+$	2	1—2 0.2738
		2—5 0.2630			3—7 0.2653			1—4 0.2722
		3—4 0.1986			4—5 0.2062			2—3 0.2892
$Al_5C^+$	1	1—2 0.2029			4—8 0.2064			2—4 0.2855
		2—3 0.1999			5—6 0.2632			2—5 0.2061
		3—4 0.2869			6—7 0.2773			2—6 0.2642
$Al_6C$	1	1—2 0.2589	$Al_7C^+$	1	1—2 0.2530			4—5 0.2001
		1—3 0.3011			1—7 0.2071			4—9 0.2665
		1—4 0.2017			2—3 0.2597			5—6 0.2271
		2—3 0.2679			3—5 0.2515			5—8 0.2266
		2—6 0.2835			3—7 0.2087			5—9 0.2229
		3—4 0.1990						6—8 0.2692
		3—5 0.2763						6—9 0.2596

$AlC$  及  $AlC^+$  如图 1(a) 所示中性团簇四重态能量最低, 二重态能量为亚稳态, 能量为 1.263 eV, 键长为 0.183 nm. 阳离子三重态能量最低, 单重态为亚稳态, 能量为 1.562 eV, 键长为 0.200 nm.

$Al_2C$  及  $Al_2C^+$   $Al_2C$  基态为三重态, 如图 1(b) 所示, 夹角为  $99^\circ$ , 图 1(c) 为亚稳态, 能量为 0.02 eV, 还有一类构型, 能量图 1(c) 相同, 但 Al-C-Al 夹角介于  $161^\circ$ — $180^\circ$  之间, 其夹角的大小与初始构型有关. 如果初始构型 Al-C-Al 夹角小于  $160^\circ$ , 则

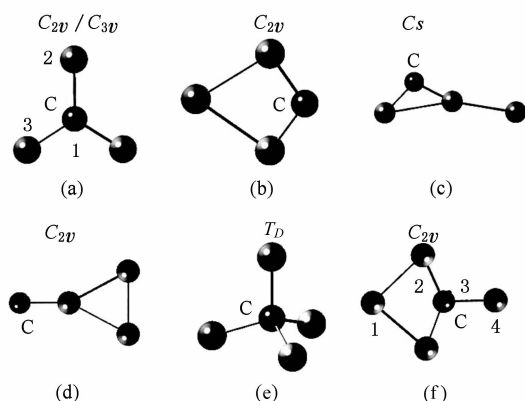
图1  $AlC$  和  $Al_2C$  结构

收敛于图 1(b) 构型, 而当初始构型 Al-C-Al 夹角大于  $160^\circ$  时, 则收敛的构型与初始构型夹角相同.  $Al_2C^+$  构型如图 1(c), 基态为四重态, 二重态为亚稳态, 能量为 0.66 eV.

$Al_3C$  及  $Al_3C^+$   $Al_3C$  基态为二重态, 如图 2(a) 所示的  $C_{2v}$  结构, 图 2(b), (c), (d) 为亚稳态, 其中 (b), (c) 为二重态, (d) 为四重态, 其能量分别为 1.77, 1.96 eV 和 4.33 eV. 对于  $Al_3C^+$  基态为图 2(a) 所示的  $C_{3v}$  结构, 亚稳态如图 2(b), (d) 所示, 能量分别为 0.78 eV 和 4.05 eV. 从构型来看  $Al_3C$  团簇可以看作是一个 C 原子打入或黏附到三角形  $Al_3$  结构, 如图 2(a), (b), (d) 所示, 整体依然保持平面结构.

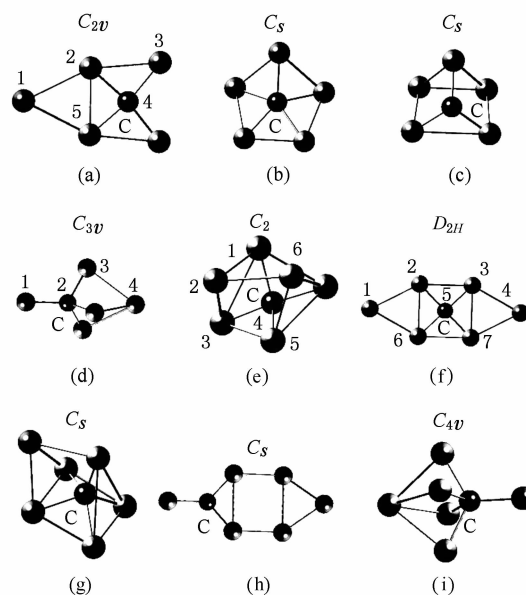
$Al_4C$  及  $Al_4C^+$   $Al_4C$  基态如图 2(a) 所示,  $T_D$

群属单重态, 亚稳态构型如图 2(f) 所示, 能量为 0.35 eV.  $Al_4C^+$  不存在  $T_d$  群结构, 基态构型如图 2(f) 所示.  $Al_4C$  的  $T_d$  群结构与 C 外层为 4 个电子结构 ( $1s^22s^22p^2$ ) 密切相关, 当与 4 个 Al ( $1s^22s^22p^63s^23p^1$ ) 结合刚好补充 4 个电子刚好形成稳定的满壳层结构. 所以如图 2(e) 的  $T_d$  群结构是合理, 且与文献[10] 所得结果一致, 而文献[10] 的计算结果与光电子光谱实验数据相符合, 这说明我们所采用的计算方法是正确的, 而文献[16] 所报道的如图 2(f) 所示结构属于激发态构型. 对于  $Al_4C^+$  团簇, 当中性团簇  $T_d$  群结构失去一个电子时, 原有的对称性将被打破, 无法维持原有的  $T_d$  群结构. 虽然  $Al_4$  不存在  $T_d$  群稳定构型, 但由于 C 的从中调和作用使得  $Al_4C$  形成了具有极高对称性的  $T_d$  群结构, 这种结构也只能存在于单重态中性团簇. 图 2(f) 构型可以看成是 C 打入 4 个 Al 构成的平行四边形结构之中, 依然保持平面结构, 当然也可以解释为 1 个 Al 接到图 2(b) C 原子右边所构成.

图 2  $Al_3C$  和  $Al_4C$  结构

$Al_5C$  及  $Al_5C^+$   $Al_5C$  基态如图 3(a) 所示, 亚稳态构型如图 3(b) (c) 所示, 能量分别为 0.06 eV 和 0.54 eV. 对于  $Al_5C^+$  基态如图 3(d) 所示, 亚稳态分别如图 3(a), (c) 所示, 其能量分别为 0.36 eV 和 0.32 eV. 图 3(a) 相当于在图 2(b) 的结构柄的位置上从旁边打入一个 Al 原子, 仍然保持  $C_{2v}$  群和平面结构. 图 3(b) 属于平面结构向立体构型的过渡, 其可看成图 3(a) 结构挤压的结果, 使得部分边角原子上翘. 图 3(c) 构型是一个非常典型的立体结构, 其相当于三棱柱状 (或称笼状)  $Al_6$  团簇中一个 Al 被 C 所替换.  $Al_5C^+$  基态构型, 可解释为  $Al_4C$  的  $T_d$  群构型从底部对称黏附一个  $Al^+$ , 由于  $Al_4C$  的  $T_d$  群对称性很高, 而 Al 原子外层有三个电子, 游离性较大

不容易与其形成稳定构型, 但当其失去一个电子成为阳离子, 其游离性减小可与  $T_d$  群的  $Al_4C$  结合组成具有较高对称性的  $C_{3v}$  群结构. 对于文献[16] 所报道  $Al_5C$  的  $C_{4v}$  群结构, 用 B3lyp/6-311G\* 计算结果包含 2 个虚频, 经过消虚频后收敛于图 3(b). C 原子牵引周围有 4 个 Al 的  $3p^1$  电子易构成以 C 为中心的高对称结构, 当增加 1 个 Al 时, 将会改变原有对称性, 如果遵循原对称性的某子对称结构, 则  $Al_5C$  会维持所遵循的子对称结构, 否则原有结构中受牵引或推挤而形成新的对称性较低构型, 如图 3(b) 的  $C_s$  群.

图 3  $Al_5C$  和  $Al_6C$  结构

$Al_6C$  及  $Al_6C^+$   $Al_6C$  基态如图 3(e) 所示属  $C_2$  群结构, 亚稳态构型如图 3(f), (g) 所示, 能量分别为 0.10 eV, 0.09 eV 和 0.93 eV.  $Al_6C^+$  基态如图 3(f) 所示, 亚稳态构型如图 3(e), (g), (h), (i) 所示, 能量分别为 0.22, 0.13, 0.79 和 0.26 eV. 图 3(e) 相当于一个 C 原子从侧面进入笼状  $Al_6$  团簇的 4 个 Al 构成的矩形面内, 但引发了一些形变——平面弯曲和三棱柱笼的扭曲, 如果 C 原子直接打入笼内就是图 3(g) 所示构型, C 基本处于笼的中心. 图 3(f), (h) 构型都源自一个 C 原子打入扁六边形  $Al_6$  团簇, 图 3(f) C 处于正中心, 所以其依然保持  $D_{2h}$  群结构, 图 3(h) 则时打入边缘的一个三角形中心, 但其影响到的对称性, 使得顶点的 Al 原子下垂, 与其顶点相对的 Al 原子上翘.  $Al_6C^+$  由于其失去一个电子所以其结构也发生了一些调整, 虽然外观没有明

显变化,但图3(e),(f),(g)群都比中性团簇有所降低,依次为 $C_1$ 、 $C_{2v}$ 和 $C_1$ 群,但图3(i)为高对称性 $C_{4v}$ 群结构.本文对文献[16]所报道 $Al_6C$ 基态构型用B3lyp/6-311G\*计算结果包含1个虚频,经过消虚频后收敛于图3(g).

$Al_7C$ 及 $Al_7C^+$ ,  $Al_7C$ 基态如图4(a)所示,亚稳态构型如图4(b)所示,能量为0.76 eV.  $Al_7C^+$ 基态如图4(c)所示,亚稳态构型如图4(b),能量为0.46 eV.图4(a)为一个C原子从顶棱打入笼状 $Al_6$ 团簇,并使得原来的棱两边的2个Al被撑开,1个Al原子连接到C原子上并在缺口的方向形成补位原子,以使得C周围被Al包围而不留空挡.图4(b)相当于1个C原子替换了笼状 $Al_6$ 的一个Al并在该顶点连接了一个补位Al或者是一个C打入笼状 $Al_6$ 并原结构撑开,然后在C相对另一侧面附着一个Al.  $Al_7C^+$ 基态是对称性较高的 $C_{2v}$ 群结构,可以理解为C从侧棱打入 $Al_6$ 笼内同时一个Al从底面附着,由于其失去一个电子,从而具有很好的结构均衡特性,更容易形成高对称群结构.

$Al_8C$ 及 $Al_8C^+$ ,  $Al_8C$ 基态如图4(d)所示,亚稳态构型有5个,分别如图4(e)—(i)所示,能量分别为0.65,0.73,0.56,0.60和0.42 eV.  $Al_8C^+$ 构型与中性团簇基本一致,基态如图4(d),亚稳态如图4(e)—(i),能量分别为0.57,0.57,0.64,0.36和0.51 eV.图4(d)相当于一个C处于笼 $Al_6$ 团簇中心构成笼状 $Al_6C$ ,另2个Al分别从笼底和笼侧附着于笼,该结构能量较低主要原因在于笼的这个侧面有着较大的空挡,新附着的Al原子起到了一个结构空挡补位作用.图4(e)结构相当于图4(d)的附着于笼侧的Al改附着在附着于笼底的Al与该底一个角的Al上,并与这两个Al形成近似于等边三角形关系.图4(f)结构相当于笼状 $Al_6C$ 在笼两个侧面对称地附着2个Al,图4(g)则是从2个底附着2个Al,图4(h)相当于图4(g)右半边的4个Al旋转 $60^\circ$ ,这种结构更具合理性,所以其能量相对于图4(g)更低,图4(i)相当于在图3(h)六边形平面结构 $Al_6C$ 的基础上上下各加一个Al形成六角12面体结构,但由于上下两个Al挤压作用使得C偏离中心.

### 3.2. 稳定性

以上计算所得到的 $Al_nC$  ( $n=1-8$ )团簇和其阳离子的谐振频率均为正值,表明各结构均为势能

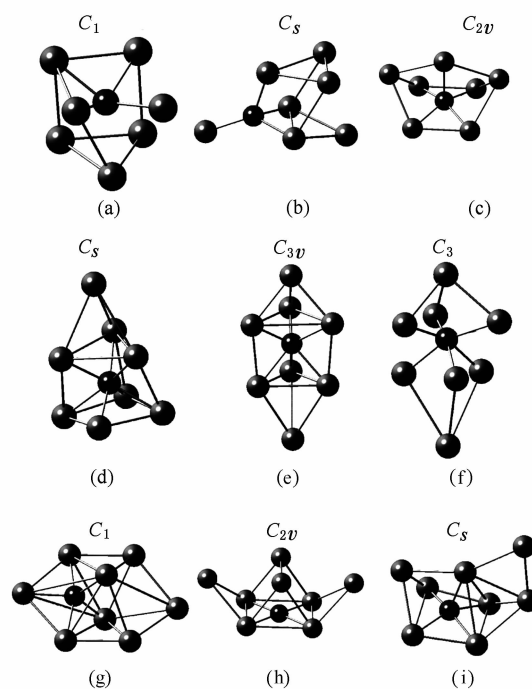


图4  $Al_7C$ 和 $Al_8C$ 结构

面上的极小点.为了进一步验证其稳定性,利用下面的公式:

$$2(Al_nC) \rightarrow (Al_{n+1}C) + (Al_{n-1}C),$$

$$2(Al_nC^+) \rightarrow (Al_{n+1}C^+) + (Al_{n-1}C^+).$$

在上式中定义 $D_2(E_n) = E_{n+1} + E_{n-1} - 2E_n$ 为 $Al_nC$ 及 $Al_nC^+$ 团簇能量的二次差分 $D_2(E_n)$ 的值列于表6中,由此得到图5所示的曲线.对于 $D_2(E_n)$ 来说,其数值越大,簇合物稳定性越高.从图5可以看出 $Al_2C$ 和 $Al_5C$ 团簇的 $D_2(E_n)$ 值较大,说明这些团簇是较稳定的.

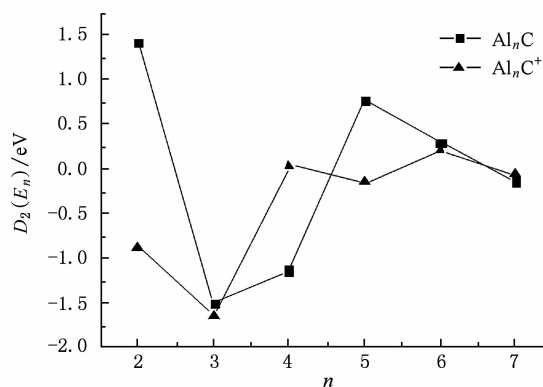


图5  $D_2(E_n)$ 与Al原子数的关系曲线

表 6  $\text{Al}_n\text{C}$  和  $\text{Al}_n\text{C}^+$  团簇能量的二次差分  $D_2(E_n)$ 

团簇	$D_2(E_n)/\text{eV}$					
	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$
$\text{Al}_n\text{C}$	1.41	-1.49	-1.13	0.76	0.29	-0.13
$\text{Al}_n\text{C}^+$	-0.86	-1.63	0.05	-0.15	0.2	-0.06

## 4. 结 论

本文用密度泛函(DFT)理论对  $\text{Al}_n\text{C}$  和  $\text{Al}_n\text{C}^+$  团簇的几何构型、稳定性及能量进行了研究,并在 B3lyp/6-311G\* 水平上进行了频率及优化计算,得到了  $\text{Al}_n\text{C}$  和  $\text{Al}_n\text{C}^+$  ( $n=1-8$ ) 团簇的基态及亚稳

态构型. 结果表明,当  $n$  较小时,  $\text{Al}_n\text{C}$  和  $\text{Al}_n\text{C}^+$  ( $n=1-8$ ) 团簇以平面结构为主,  $n$  增大时开始向立体结构过渡. 平面结构以 3 个 Al 构成三角形结构, 立体结构以 6 个 Al 围成笼状结构, 这些结构中以 C 居于中心位置为能量最低构型. 通过对中性与阳离子团簇比较, 我们发现那些对称性高的构型, 往往二者不能并存, 如  $\text{Al}_4\text{C}$  的  $T_d$  群结构、 $\text{Al}_5\text{C}^+$  的  $C_{3v}$  群结构、 $\text{Al}_6\text{C}^+$  的  $C_{4v}$  群结构、 $\text{Al}_7\text{C}^+$  的  $C_{2v}$  群结构等, 这与团簇的电子结构有关, 无论是得到还是失去 1 个电子, 都将会打破这种高对称性结构. 另外, 在  $\text{Al}_n\text{C}$  和  $\text{Al}_n\text{C}^+$  团簇中,  $\text{Al}_2\text{C}$  和  $\text{Al}_5\text{C}$  团簇的  $D_2(E_n)$  值较大, 说明这些团簇是较稳定的.

感谢西北大学物理所提供计算方面的帮助.

- [1] Gao H, Liao L Z, Zhang Z H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 427 (in Chinese) [高 皓、廖龙忠、张朝晖 2009 物理学报 **58** 427]
- [2] Huang L Q, Pan H Q, Wang J, Tong H M, Zhu K, Ren G X, Wang Y C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6712 (in Chinese) [黄丽清、潘华强、任冠旭、童慧敏、王 军、王永昌、朱 可 2007 物理学报 **56** 6712]
- [3] Kawamata H, Negishi Y, Nakajima A, Kaya K 2001 *Chem. Phys. Lett.* **337** 255
- [4] Liu Z Y, Wang C R, Huang R B, Zheng L S 1995 *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **141** 201
- [5] Chertihin G V, Andrews L, Taylor P R 1994 *J. Am. Chem. Soc.* **116** 3513
- [6] Zhao J J, Liu B C, Zhai H J, Zhou R F, Ni G Q, Xu Z Z 2002 *Solid State Commun.* **122** 543
- [7] Largo A, Redondo P, Barrientos C 2002 *J. Phys. Chem. A* **106** 4217
- [8] Boldyrev A I, Simons J, Li X, Wang L S 1999 *J Am Chem Soc* **121** 10193
- [9] Boldyrev A I, Simons J, Li X, Chen W W, Wang L S 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 8980
- [10] Li X, Wang L S, Boldyrev A I, Simons J 1999 *J. Am. Chem. Soc.* **121** 6033
- [11] Boldyrev A I, Simons J, Li X, Wang L S 1999 *J. Chem. Phys.* **111** 4993
- [12] Cannon N A, Boldyrev A I, Li X, Wang L S 2000 *The J. Chem. Phys.* **113** 2671
- [13] Li X, Wang L S, Cannon N A, Boldyrev A I 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 1330
- [14] Li X, Wang L S 2002 *Phys. Rev. B* **65** 153404
- [15] Leskiw B D, Castleman A W 2000 *Chem. Phys. Lett.* **316** 31
- [16] Ashman C, Khanna S, Pederson M 2000 *Chem. Phys. Lett.* **324** 137
- [17] Naumkin F Y 2008 *J. Phys. Chem. A* **112** 4660
- [18] Gou B C, Gu J, Wang S Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3338 (in Chinese) [苟秉聪、顾 娟、王山鹰 2009 物理学报 **58** 3338]
- [19] Chen X, Deng K M, Wang N Y, Xiao C Y, Yang J, Zhu D J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3112 (in Chinese) [陈 宣、邓开明、王倪颖、肖传云、杨 剑、朱冬玖 2009 物理学报 **58** 3112]
- [20] Jiang Z Y, Luo X M, Li S T, Chu S Y 2006 *Int. J. Mass spectrom.* **252** 197

# Study on structure and stability of $Al_n C$ and $Al_n C^+$ ( $n=1-8$ )<sup>\*</sup>

Feng Xuan-Qi<sup>1)</sup> Feng Xue-Hong<sup>2)</sup> Jiang Zhen-Yi<sup>3)†</sup>

1) (*Physics Department, Northwest University, Xi'an 710069, China*)

2) (*Science School, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

3) (*Modern Physics Institute, Northwest University, Xi'an 710069, China*)

(Received 19 November 2009; revised manuscript received 18 December 2009)

## Abstract

Comparing the results of AlC cluster, computed by 7 methods of density functional theory (DFT), with experimental data, we choose B3lyp/6-311G(d) to optimize the structures and analyse the frequencies of  $Al_n C$  and  $Al_n C^+$  ( $n=1-8$ ) clusters. All ground states and metastable states of  $Al_n C$  and  $Al_n C^+$  clusters are obtained. Our calculations reveal that there exists a transition from planar to spacial structures with the number of Al atoms increasing. Planar structures is mostly triangle and spacial structure is primarily triangular prism cage structure. Of the high symmetry clusters, only one of neutral and cation has a stable structure. Compared with various kinds of  $Al_n C$  and  $Al_n C^+$  ( $n=1-8$ ) clusters under study,  $Al_2 C$  and  $Al_5 C$  are stable.

**Keywords:**  $Al_n C$  clusters, density functional theory(DFT), geometric structure

**PACC:** 3640B, 3640C, 7115M

<sup>\*</sup> Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2009CB626611); the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974152).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: jiangzy@nwu.edu.cn