

# $Au_n Y$ ( $n = 1-9$ ) 掺杂团簇的结构和电子性质研究\*

毛华平<sup>1)†</sup> 王红艳<sup>2)††</sup> 朱正和<sup>2)</sup> 唐永建<sup>3)</sup>

1) 重庆三峡学院化学与环境工程系, 万州 404000)

2) 四川大学原子分子物理所, 成都 610065)

3) 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2005 年 11 月 22 日收到 2006 年 3 月 4 日收到修改稿)

采用相对论有效原子实势(RECP)近似和密度泛函(B3LYP)方法, 选择 LANL2DZ 基组, 优化得到了  $Au_n Y$  ( $n = 1-9$ ) 二元掺杂团簇稳定的基态结构和电子性质. 研究结果表明, 掺杂 Y 原子的  $Au_n Y$  ( $n = 1-9$ ) 团簇随  $n$  的变化, 其电离势、电子亲和能和费米能级与  $Au_n$  ( $n = 2-9$ ) 一样具有“奇-偶”振荡效应; 团簇离子的稳定性具有“幻数”现象,  $Au_2 Y^+$  和  $Au_6 Y^+$  比其他团簇离子更稳定, 与质谱实验结果一致; 同一团簇中, 团簇最稳定的异构体(基态)是趋于 Y 原子有最大的邻近的 Au 原子数.

关键词: Au-Y 团簇, 密度泛函, 平衡几何结构, 电子性质

PACC: 3640, 3640B, 3120A, 3130J

## 1. 引言

近年来, 随着单一成分团簇研究的逐步深入, 混合/掺杂团簇研究逐渐成为团簇科学研究的一个重点. 单一成分贵金属团簇具有典型的电子壳层结构, 理论和实验研究较多<sup>[1-3]</sup>. 随着小金团簇催化活性的发现, 展开了一些金的混合团簇的研究<sup>[4-10]</sup>. Bouwen 等利用双激光溅射双金属靶, 制得了  $Au_n X_m^+$  ( $X = Cu, Al, Y, In$ ) 团簇<sup>[9]</sup>, 并采用质谱技术研究了其稳定性; Heinebrodt 等用质谱法研究了  $Au_n X_m^+$  ( $X = Al, In, Cs$ ) 的稳定性和离解能<sup>[10]</sup>, 证明了 Au 混合二元团簇的电子壳层结构; Koyasu 等利用光电子谱测定了  $Au_n Pd^+$  ( $n = 1-4$ ) 的电子亲和能和垂直离解能<sup>[11]</sup>. 在理论研究方面, Metadier 等人采用紧束缚势方法计算了  $CuAu$ ,  $CuAu_2$ ,  $CuAu_3$  和  $Cu_6 Au_8$  团簇的结构和态密度, 随配位数的增加,  $Cu-Au$  间的核间距和相互作用势增加<sup>[12]</sup>; Tanaka 等采用密度泛函的方法研究了  $Au_n Zn$  ( $n \leq 6$ ) 团簇的结构和稳定性<sup>[13]</sup>; Yuan 等研究了  $Au_n M$  ( $n = 1-7, M = Ni, Pd, Pt$ ) 团簇的结构和电子性质<sup>[14]</sup>; 王红艳等采用密度泛函 B3LYP 方法, 通过对  $Au_n$  团簇中分别掺入 Cu 等原子

后形成的二元混合团簇的结构、电子性质和电子结构能带的分析, 得出了二元混合团簇稳定性的一些初步规律<sup>[15]</sup>. 但对 Au 团簇中掺入 Y 原子的理论研究, 文献报道较少.

在惯性约束聚变(ICF)研究中,  $Au, Y$  混合纳米团簇独特的能级结构和激光-X 射线转换特性被认为是一种最佳的能谱转换靶材料, 研究其基态结构与电子性质意义重大. 由于 d 轨道的存在, 金团簇电子结构较复杂, 对 Au 体系考虑旋-轨耦合和电子相关效应是很重要的, 计算的不确定性对 IB 族金属团簇的影响比 IA 族的金属团簇的影响更大, 因此金团簇由平面结构转化为三维立体结构的转化点一直存在争议<sup>[16]</sup>. Ryan 等采用两种密度泛函方法 PW91 和 B3LYP, 二阶微扰方法(MP2)和偶合团簇(CCSD(T))方法预测出不同的金团簇的立体结构的转化点: MP2 和 CCSD(T)方法均表明转化点位于  $Au_6$  与  $Au_8$  之间, 与作者采用 B3LYP 方法得到的结论一致<sup>[2]</sup>. 为了与  $Au_n$  ( $n = 2-9$ ) 结构进行比较, 本文采用 B3LYP 方法和  $19(5s^2 5p^6 5d^{10} 6s)$  价电子壳层基函数的相对论有效势(19-RECPs), 系统地研究  $Au_n Y$  ( $n = 1-9$ ) 小团簇的几何结构和电子性质, 并与  $Au_{2-9}$  金属团簇进行比较, 为制备理想的能谱转换靶材料

\* 重庆市教委科研项目(批准号: KJ051105)和国家自然科学基金(批准号: 10276028)资助的课题.

† E-mail: maohuaping129mby@163.com

†† E-mail: wanghyxx@yahoo.com

提供理论参考.

## 2. 结果与讨论

### 2.1. 平衡几何结构

采用 Gaussian 98 程序, 用含有电子相关效应的密度泛函方法 B3LYP 由 Becke 建议的杂化交换函数和 Lee-Yang-Parr 相关函数组成<sup>[17,18]</sup>, 选择

LANL2DZ 基组, 对  $Au_nY$  ( $n = 1-9$ ) 小团簇各种不同的拓扑构型和可能的自旋多重性分别进行键长、键角优化, 自洽过程以体系的能量是否收敛为依据, 能量收敛精度优于  $10^{-6}$  a. u. . 在此基础上, 再计算可能稳定结构的振动频率, 能量最低的构型为稳定的基态结构(图 1). 图 1 中各原子括号内的数为 Mulliken 电荷分布, 其他的值为键长 (nm),  $Au_7Y$ ,  $Au_8Y$  和  $Au_9Y$  的键长及  $Au_8Y$  和  $Au_9Y$  的 Mulliken 电荷分布, 见表 1.

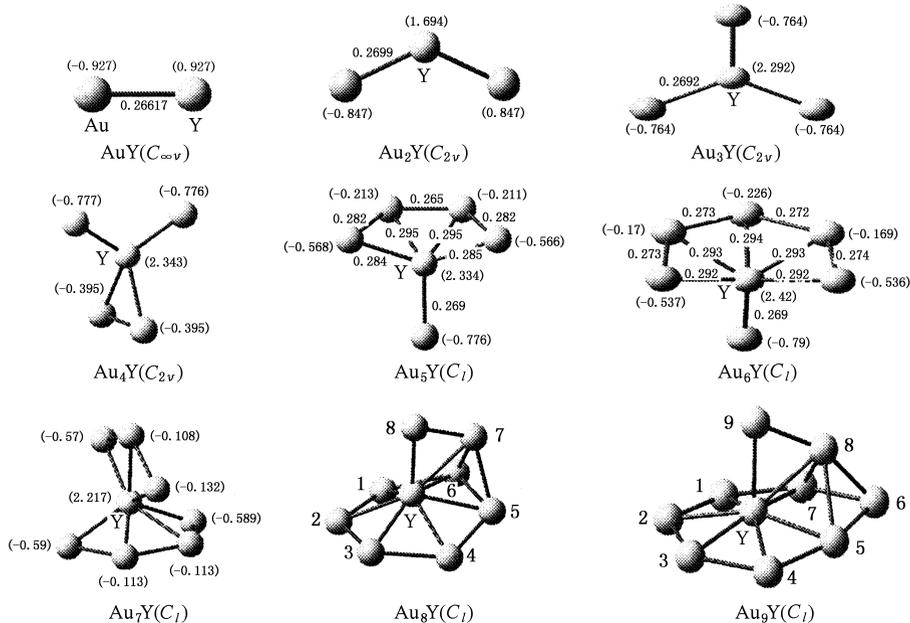


图 1  $AuY-Au_9Y$  团簇的基态结构和 Mulliken 电荷分布

表 1  $Au_nY$  ( $n = 7, 8, 9$ ) 团簇的键长 (0.1 nm) 和 Mulliken 电荷分布

$Au_7Y$	$Au_8Y$				$Au_9Y$				
	$Au_8Y$		Mulliken 电荷		$Au_9Y$		Mulliken 电荷		
1—2	2.78	1—2	2.82	I (Au)	-0.248	1—2	2.73	I (Au)	-0.050
2—3	2.70	2—3	2.71	2	-0.244	1—7	2.68	2	-0.458
3—4	2.78	3—4	2.90	3	-0.343	2—3	2.77	3	-0.459
5—6	2.66	4—5	2.72	4	-0.263	3—4	2.73	4	-0.050
6—7	2.83	5—6	2.90	5	-0.141	4—5	2.68	5	-0.158
1—Y	2.88	5—7	2.79	6	-0.170	5—6	2.83	6	-0.265
2—Y	3.08	1—6	2.76	7	-0.124	6—7	2.83	7	-0.159
3—Y	3.07	7—8	2.77	8	-0.610	6—8	2.70	8	0.048
4—Y	2.88	1—Y	2.95	Y	2.143	7—8	2.77	9	-0.507
5—Y	3.03	2—Y	2.95			8—9	2.65	Y	2.057
6—Y	2.90	3—Y	2.98			1—Y	2.94		
7—Y	2.86	4—Y	2.93			2—Y	2.99		
		5—Y	3.01			3—Y	2.99		
		6—Y	3.05			4—Y	2.93		
		7—Y	3.08			5—Y	3.06		
		8—Y	2.89			7—Y	3.06		
						8—Y	3.02		
						9—Y	2.68		

AuY 属  $C_{\infty v}$  群的线性结构,优化平衡结构的键长为 0.2662nm,基态能量为  $-173.3880a.u.$ ,基电子态( $^1\Sigma$ )的振动频率为  $\omega_e = 202.486cm^{-1}$ ,Au-Y 的键能为 2.7504eV,比 Au-Au 键能大,本文研究的  $Au_nY$  ( $n = 1-9$ )中 Y 原子全是带正电荷,这是因为 Au 原子的鲍林电负性(Pauling electronegativity)为 2.54 比 Y 原子的 1.22 大得多的缘故. $Au_2Y$  的稳定基态构型为钝角三角形(Au-Y-Au), $\angle AuYAu = 138.085^\circ$ , $R_{Au-Y} = 0.2699nm$ . $Au_3Y$  团簇具有  $C_{2v}$  对称性的平面结构,基电子态 $^1A_1$  的能量为  $-444.5025a.u.$ ,Y 原子的 Mulliken 电荷分布为 2.292,在  $Au_3Y$  团簇中 Y 原子提供了 3 个价电子,而一个 Au 原子只提供了一个价电子参与团簇的成键. $Au_4Y$  具有  $C_{2v}$  对称性的三维立体结构,能量为  $-579.9929a.u.$ . $Au_5Y$  团簇与  $Au_6$  团簇的结构完全不同, $Au_6$  是平面结构,而  $Au_5Y$  是立体结构,能量为  $-715.5164a.u.$ ,掺杂的一个 Y 原子提供了 3 个价电子参与团簇成键. $Au_6Y$ , $Au_7Y$ , $Au_8Y$  和  $Au_9Y$  的基态结构都具有  $C_1$  对称性,它们的平均键长( $\bar{R}$ )、能量和平均配位数(CN)列于表 2.

表 2  $Au_nY$  ( $n = 1-9$ )团簇的结构参数

团簇	对称性	$E/a.u.$	$\bar{R}/nm$	CN
AuY	$C_{\infty v}$	-173.388024	0.2662	1.00
$Au_2Y$	$C_{2v}$	-308.941393	0.2699	1.33
$Au_3Y$	$C_{2v}$	-444.502482	0.2691	1.50
$Au_4Y$	$C_{2v}$	-579.992943	0.2784	2.00
$Au_5Y$	$C_1$	-715.516352	0.2578	2.67
$Au_6Y$	$C_1$	-851.016352	0.2850	2.86
$Au_7Y$	$C_1$	-986.536906	0.2879	3.50
$Au_8Y$	$C_1$	-1122.042092	0.2724	3.67
$Au_9Y$	$C_1$	-1257.571929	0.2812	4.00

## 2.2. 团簇的电子特性

### 2.2.1. 团簇的电离势和电子亲和能

为了研究  $Au_nY$  的电子性质,本文计算了  $Au_nY^+$  ( $n = 1-9$ )小团簇的结构,表 3 列出了  $Au_nY^-$  的垂直电离势和绝热电离势.其数值都出现了“奇-偶”振荡现象,即  $n$  为奇数的  $Au_nY$  团簇,其电离势比相邻  $n$  为偶数的要大,如图 2(a)所示,这是由于在  $Au_nY$  中一个 Y 原子提供了 1 个或 3 个价电子,一个 Au 原子提供了一个价电子参与成键,当  $n$  为奇数时,成键电子总数为  $(1+n)$  或  $(3+n)$  为偶数,电子轨道占满,团簇较稳定,电离势较大.反之,当  $n$  为偶数时,成键电子总数  $(1+n)$  或  $(3+n)$  为奇

数,有一个未成对的单电子,较易失去,电离势较小. $AuY-Au_9Y$  团簇电离势的“奇-偶”振荡效应与  $Au_2-Au_9$  团簇相似<sup>[2]</sup>.

团簇的电子亲和能  $E_A$  是团簇尺寸的函数,它有助于人们揭示  $Au_nY$  团簇的演化规律.从 AuY 到  $Au_9Y$  团簇电子亲和能的大小随团簇尺寸大小变化与电离势一样呈“奇-偶”振荡,如图 2(b),即  $n$  为奇数时, $Au_nY$  团簇的电子亲和能比相邻  $n$  为偶数的团簇小;  $n$  为偶数时, $Au_nY$  团簇的电子亲和能比邻近  $n$  为奇数的团簇大. $AuY-Au_9Y$  电子亲和能交替变化,也是由于电子配对效应引起的. $Au_{n-1}Y$  电子亲和能与  $Au_n$  相比较, $n = 2-4$ ,相差较大,当  $n > 4$  时,相差较小.

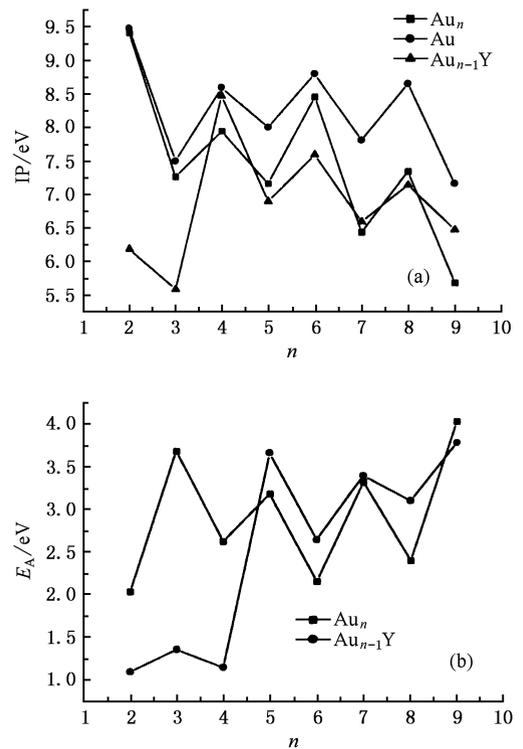


图 2  $Au_n$  和  $Au_{n-1}Y$  团簇的垂直电离势和电子亲和能与团簇大小变化的比较 (a) 电离势(IP); (b) 亲和能( $E_A$ )

### 2.2.2. 团簇的能级分布

Au 原子的 d 壳层为满壳层,价电子 s 层只有一个电子,在凝聚态中,由于 d 层的能量比费米能级低,因此这些价 s 电子表现在壳层结构中就像自由电子,同时电子由于边界的限制,当金属的体积减小到纳米量级时能谱将分裂而不连续.Y 原子的价电子是  $3d4s^2$ ,与 Au 原子形成  $Au_nY$  混合团簇时,Y 原子的 1 个或 3 个价电子和  $n$  个 Au 原子的  $n$  个电子

共  $(1+n)$  或  $(3+n)$  个形成价壳层的成键电子, 能级不连续分布(图 3) 图中实线为占据轨道, 虚线为空轨道, 从图 3 可以看出, 最高占据轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO), 随  $n$  有一个不明显的“奇-偶”交替变化的现象, 与单一的  $Au_n$  团簇相似<sup>[2]</sup>, 而  $n = 6-9$  时,  $Au_n Y$  混合团簇的 HOMO 和 LUMO 却变化很小.

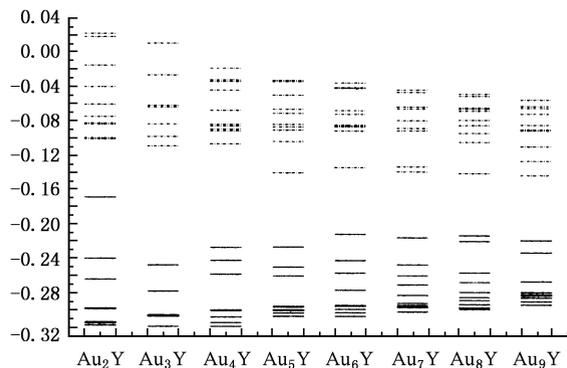


图 3  $Au_n Y$  ( $n = 2-9$ ) 能级分布

$Au_n$ ,  $Au_{n-1} Y$  团簇的费米能级和能隙与团簇大小的关系比较如图 4 所示:  $Au_{n-1} Y$  的费米能级随  $n$  的变化像  $Au_n$  团簇一样也有“奇-偶”振荡现象, 但能隙却没有<sup>[2]</sup>,  $n = 2-4$   $Au_n$  和  $Au_{n-1} Y$  团簇的费米能级相差较大,  $n = 5$  时, 费米能级相差较小,  $n > 6$  时,  $Au_{n-1} Y$  的费米能级变化很小, 能隙随  $n$  的变化也

较平缓, 而  $Au_n$  团簇在研究的整个区间起伏较大, 这与结构有关, 当  $n > 6$  时, 每增加一个 Au 原子, 混合团簇的结构变化不明显.

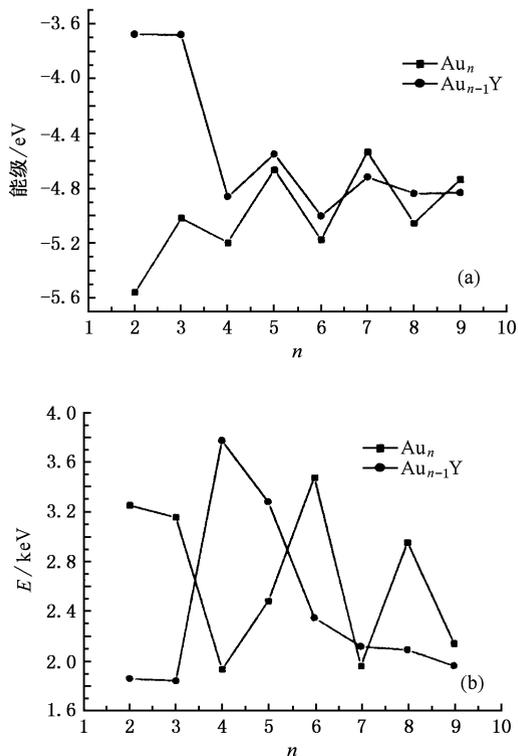


图 4  $Au_n$  和  $Au_{n-1} Y$  团簇的费米能级和能隙与团簇大小的关系 (a) 费米能级 (b) 能隙

表 3  $Au_n Y$  ( $n = 1-8$ ) 团簇的最高占据轨道(HOMO)、最低空轨道(LUMO)、费米能级(Fermi level)、能级间隙(HLG)、电子亲和能( $E_A$ )和垂直绝热电离势(IP)

团簇	HOMO/a. u.	LUMO/a. u.	Fermi level/eV	HLG/eV	$E_A$ /eV	IP/eV	
						垂直	绝热
AuY	-0.16924	-0.10093	-3.6759	1.8588	1.0908	6.1798	6.5068
Au <sub>2</sub> Y	-0.16911	-0.10141	-3.6806	1.8422	1.3533	5.5773	6.3413
Au <sub>3</sub> Y	-0.24812	-0.10940	-4.8643	3.7748	1.1416	8.4787	8.4949
Au <sub>4</sub> Y	-0.22767	-0.10709	-4.5547	3.2812	3.6622	6.8890	7.9505
Au <sub>5</sub> Y	-0.22710	-0.14078	-5.0053	2.3489	2.6407	7.5865	7.7284
Au <sub>6</sub> Y	-0.21257	-0.13455	-4.7228	2.1230	3.3902	6.5757	7.2557
Au <sub>7</sub> Y	-0.21643	-0.13938	-4.8412	2.0967	3.0964	7.1277	7.3170
Au <sub>8</sub> Y	-0.21390	-0.14148	-4.8352	1.9707	3.7800	6.4505	7.2012

掺杂原子 Y 替代 Au 原子后, 最高占据轨道(HOMO)发生改变的是 AuY, Au<sub>2</sub>Y, Au<sub>5</sub>Y 和 Au<sub>7</sub>Y 比掺杂前增大, 由 Koopmanns 定理可知, 表明比掺杂前更易失去电子, 而 Au<sub>3</sub>Y, Au<sub>4</sub>Y 和 Au<sub>6</sub>Y 比掺杂前更难失去电子, Au<sub>8</sub>Y 和 Au<sub>9</sub> 则变化较小. 对于最低空

轨道(LUMO),  $Au_n Y$  ( $n = 1-4$ ) 比掺杂前对应的 Au 团簇都增高, 表明掺杂后较难失去电子.  $Au_n Y$  ( $n = 5-8$ ) 比掺杂前对应的 Au 团簇都降低, 表明掺杂后更容易失去电子.

能隙(HLG)的大小反映了电子从占据轨道向空

轨道发生跃迁的能力,在一定程度上代表分子参与化学反应的能力,还反映了电子从占据轨道向空轨道发生跃迁的电子光谱频率的大小.能隙(HLG)的变化是  $Au_3Y$ ,  $Au_4Y$ ,  $Au_6Y$  比掺杂前对应的  $Au_n$  团簇都增大,化学活性降低,可能的电子跃迁光谱频率增大; $AuY$ ,  $Au_2Y$ ,  $Au_5Y$ ,  $Au_7Y$  和  $Au_8Y$  比掺杂前对应的  $Au_n$  团簇都减小,化学活性增大,可能的电子跃迁光谱频率减小.根据掺杂前后能隙的变化,选择不同的掺杂方式可以设计具有各种需要的能谱转换靶材料.

### 2.3. $AuY^+ - Au_nY^+$ 团簇离子的稳定性

理论上常用能量的一阶或二阶微商来确定幻数.通过分析团簇的能量变化特点,可以研究其稳定性,两相邻团簇的能量差  $\Delta E$  和总能的二阶差分  $\Delta_2 E$  分别为

$$\Delta E(n) = E(n) - E(n-1),$$

$$\Delta_2 E(n) = E(n-1) + E(n+1) - 2E(n).$$

图 5 给出了  $Au_nY^+(n=1-9)$  的  $\Delta E-n$  曲线(图 b)和  $\Delta_2 E-n$  曲线(图 a).  $Au_nY^+$  团簇的能量差和能量的二阶差分表现出“奇-偶”振荡,  $Au_nY^+$  团簇( $n=1-9$ )总能的二阶差分  $\Delta_2 E$  随  $n$  的“奇-偶”振荡变化比相邻团簇的能量差  $\Delta E$  随  $n$  的变化更明显,“奇-偶”振荡变化特性和  $Au_n(n=2-9)$  团簇相似.

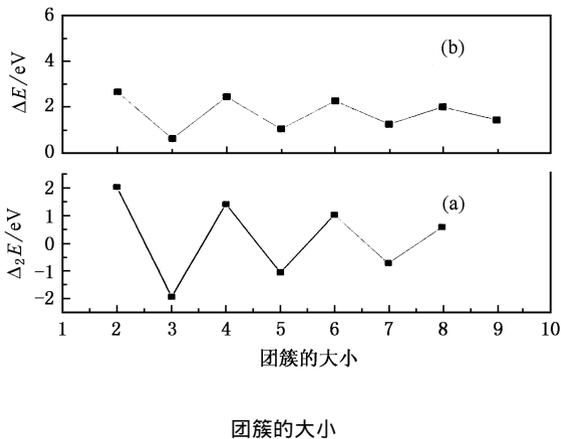


图 5 团簇离子  $Au_nY^+$  的  $\Delta E, \Delta_2 E$  “奇-偶”振荡:效应 (a)  $\Delta_2 E(n) = E(n-1) + E(n+1) - 2E(n)$  (eV); (b)  $\Delta E(n) = E(n) - E(n-1)$  (eV) 纵坐标的值分别减去 3686eV 这一常数)

质谱法是研究团簇稳定性随团簇大小变化的一个最重要的实验手段,其影响因素与团簇的电子结构,团簇的几何结构有关, Bouwen 等人采用双激光溅射双金属靶方法制成了 Au 和 Y 的混合团簇,然后通过飞行时间质谱方法研究了它们的稳定性<sup>[9]</sup>.  $Au_nY_1^+$  质谱图有两个明显的特点:一个是  $Au_2Y^+$  和  $Au_6Y^+$  的波峰很高显示其电子的稳定性,  $Au_2Y^+$  和  $Au_6Y^+$  的成键电子总数分别为 2 和 8 具有封闭电子壳层结构,在  $Au_2Y^+$  中,一个 Au 原子提供一个价电子, Y 原子也只提供了一个价电子,价壳层的电子总数为  $2 + 1 - 1 = 2$ ; 在  $Au_6Y^+$  中, Y 原子提供了三个价电子,价壳层的电子总数为  $6 + 3 - 1 = 8$ , 分别填满 Wood-Saxon 球对称势的能级  $1s$  (2 个电子),  $1p$  (6 个电子), 具有封闭电子壳层, 团簇稳定. 另一特点是随着  $n$  的变化, 波峰有“奇-偶”振荡效应, 这些与计算结果一致, 表明本文采用理论计算方法的合理性.

### 3. 结 论

采用密度泛函(B3LYP)方法,选择 LANL2DZ 基组,研究了 Au-Y 二元金属团簇的几何结构、电离势、电子亲和能、能级结构分布和团簇离子的稳定性等性质.  $Au_2Y$  的基态具有  $C_{2v}$  构型的角形结构;  $Au_3Y$  的基态具有  $C_{2v}$  构型,三个 Au-Y 键的键长相等,但键角分别为  $119.96^\circ, 119.96^\circ, 120.08^\circ$ , 四个原子在一个平面上;  $Au_4Y - Au_9Y$  具有空间立体结构. Au-Y 键能大于 Au-Au 键能,掺杂 Y 原子的混合团簇  $Au_nY(n=1-9)$  的费米能级,电离势和电子亲和能都是团簇体积的函数,它们随着  $n$  的变化而变化,均有“奇-偶”振荡现象,这是由团簇的成键电子体系总价电子数的奇偶变化及对应的壳层模型轨道的电子填充决定的.  $Au_nY$  混合团簇适合于“壳层模型”效应,结合实验研究了  $Au_nY^+(n=1-9)$  团簇离子的稳定性,结果表明:  $Au_2Y^+$  和  $Au_6Y^+$  比其他团簇离子更稳定,与质谱实验结果完全符合. 同一团簇中, Au-Y 混合团簇最稳定的异构体是趋于 Y 原子有更大的邻近的 Au 原子数.

- [ 1 ] Wang H Y , Li C Y , Tang Y J *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 677
- [ 2 ] Mao H P , Wang H Y , Ni Y *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1766  
( in Chinese ) [ 毛华平、王红艳、倪羽等 2004 物理学报 **53** 1766 ]
- [ 3 ] Li X B , Wang H Y , Tang Y J *et al* 2004 *Chin. J. Atom. Mol. Phys.* **21** 388 ( in Chinese ) [ 李喜波、王红艳、唐永建等 2004 原子与分子物理学报 **21** 388 ]
- [ 4 ] Koszinowski K , Schröder D , Schwarz H. 2003 *Chem Phys Chem.* **4** 1233
- [ 5 ] Häkkinen H , Abbet S , Sanchez A *et al* 2003 *Chem. Int. Ed.* **42** 1297
- [ 6 ] Pyykkö P , Runeberg N 2002 *Chem. , Int. Ed.* **41** 2174
- [ 7 ] Li X , Kiran B , Li J *et al* 2002 *Angewandte Chemie-International Edition* **41** 4786
- [ 8 ] Neukermans S , Janssens E , Tanaka H *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 033401
- [ 9 ] Bouwen W , Vanhoutte F , Despa F *et al* 1999 *Chem. Phys. Lett.* **314** 227
- [ 10 ] Heinebrodt M , Malinowski N , Tast F *et al* 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 9915
- [ 11 ] Kiichirou K , Masaaki M , Atsushi N *et al* 2002 *Chem. Phys. Lett.* **224** 358
- [ 12 ] Metadier N , Laref A , Khelifa B *et al* 2001 *Superlattices and Microstructure* **30** 21
- [ 13 ] Hiromasa T , Sevn N , Ewald J *et al* 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 7114
- [ 14 ] Yuan D W , Wang Y , Zeng Z H 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 114310
- [ 15 ] Wang H Y , Wang H Y , Shen X H *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3565 ( in Chinese ) [ 王红艳、唐永建、湛小红等 2005 物理学报 **54** 3565 ]
- [ 16 ] Ryan M O , Sergey V , Mark S G *et al* 2004 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 1049
- [ 17 ] Becke A D 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 5648
- [ 18 ] Lee C , Yang W , Parr R G 1988 *Phys. Rev. B* **37** 785

## Geometry and electronic properties of bimetallic $Au_n Y$ ( $n = 1-9$ ) clusters<sup>\*</sup>

Mao Hua-Ping<sup>1</sup>✉† Wang Hong-Yan<sup>2</sup>†† Zhu Zheng-He<sup>2</sup>) Tang Yong-Jian<sup>3</sup>)

1 ) ( Department of Chemistry , Chongqing , Three-Gorge College , Wanzhou 404000 , China )

2 ) ( Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China )

3 ) ( Research Center of Laser Fusion , CAEP , Mianyang 621900 , China )

( Received 22 November 2005 ; revised manuscript received 4 March 2006 )

### Abstract

A systematic study on the equilibrium geometries and electronic properties of Y-doped gold clusters has been studied by density functional theory calculations. The stability and electronic properties of doped gold clusters are similar to that of pure gold clusters. Their ionization potential and electron affinities alter with odd-even oscillation as a function of the number of atoms. The magic-number behaviour is observed in the Y-doped gold cluster cations, which is in good agreement with the mass spectrum experiment. Thus  $Au_2 Y^+$  and  $Au_6 Y^+$  are more stable than other clustered cations. The most stable isomers of the Y-doped gold cluster tend to have the maximized coordination number of Au atom.

**Keywords :** Au-Y cluster , density functional theory , equilibrium geometries , electronic properties

**PACC :** 3640 , 3640B , 3120A , 3130J

\* Project supported by the Education Committee of Chongqing ( Grant No. KJ051105 ) and the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10276028 ) .

† E-mail : maohuaping129mby@163.com

†† E-mail : wanghyxx@yahoo.com