

学校编码: 10384  
学号: 19820061151803

分类号\_\_密级\_\_  
UDC\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

金属小团簇磁性的第一性原理计算

*Ab initio* calculations on the magnetism of small-sized  
metal clusters

庄琼云

指导教师姓名: 朱梓忠 教授  
专 业 名 称: 凝 聚 态 物 理  
论文提交日期: 2009 年 月  
论文答辩时间: 2009 年 月  
学位授予日期: 2009 年 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_  
评 阅 人: \_\_\_\_\_

2009 年 月

## 厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为( )课题(组)的研究成果,获得( )课题(组)经费或实验室的资助,在( )实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

# 厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，  
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

## 摘要

金属团簇是团簇家族中的重要成员，在理论和实验方面都得到了广泛的研究。小的金属团簇通常能够表现出净磁矩，对于金属团簇的电子结构和磁性的研究可以更好的理解金属团簇的物理和化学特性。密度泛函理论的发展就为物质的电子结构性质的理论研究打开了一个广阔的天地，提供了关键的方法步骤。本论文中采用了基于自旋极化的密度泛函理论的第一原理方法，对简单金属小团簇  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) 的磁性，重金属小团簇  $W_n$  ( $n = 2-7$ ) 磁性， $Al_4$  团簇在 NaCl (001) 表面的结构和磁性进行了计算，主要包括：

1) 对简单金属铝的小团簇  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) 的结构特性和磁性进行了理论计算。结果表明：团簇的结合能随着团簇中原子数的增加而增大；虽然 Al 是简单金属，但是其小团簇  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) 具有磁性，磁矩在  $1\mu_B$  和  $2\mu_B$  间变化；通过能级图分析了  $Al_n$  团簇磁矩的变化规律。此外，还分析了  $Al_n$  团簇的磁矩，结合能，能量的一阶和二阶差分随原子数  $n$  的变化，讨论了最稳定团簇  $Al_5$  的电子结构和电荷密度。

2) 对重金属钨的小团簇  $W_n$  ( $n = 2-7$ ) 的结构特性和磁性进行了理论计算。结果表明：团簇的结合能随着团簇中原子数的增加而增大；虽然 W 的体材料不具有磁性，但是 W 的一些小团簇可以表现出磁性，如  $W_3$ 、 $W_4$  和  $W_7$ ，其磁矩均为  $2\mu_B$ ；通过能级图我们分析了  $W_n$  团簇磁矩的变化情况。此外，还分析了  $W_n$  团簇的磁矩，结合能，能量的一阶和二阶差分随原子数  $n$  的变化，讨论了最稳定团簇  $W_4$  的电子结构和电荷密度。

3) 对  $Al_4$  团簇在 NaCl (001) 表面的结构和磁性进行计算。我们计算了  $Al_4$  团簇的重心吸附在 NaCl 表面上两种桥位，两种空位，在 Na 原子的顶位以及在 Cl 原子的顶位的结构、平均每个 Al 原子的吸附能、最低的 Al 原子和 NaCl (001) 表面原子之间的距离和磁矩。计算结果表明： $Al_4$  团簇的重心吸附在 NaCl 表面上 Na 的顶位是最稳定的结构，吸附能最大，总能最大，最低的 Al 原子和 NaCl (001) 表面原子之间的距离最小，但是团簇的磁矩为零；而在其他位置  $Al_4$  团簇保留了团簇在自由空间的磁矩。

**关键词：** 金属团簇； 磁性； 从头计算

## Abstract

Metal clusters are important members of the cluster family, and many theoretical and experimental studies have been carried out on their properties. Small metal cluster usually shows magnetism. The study of the electronic structures and magnetism of metal clusters could help us understand the physical and chemical properties of metal clusters better. The development of density functional theory (DFT) has an opened a wide realm for the studies of electronic structures, and provided a pivotal scheme. In this dissertation, by employing the first-principles calculations based on the spin-polarized density functional theory, the structural properties and magnetism of  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ),  $W_n$  ( $n = 2-7$ ) small clusters and  $Al_4$  clusters on the NaCl(001) surface have been studied. The main results are as following:

1) The structural properties and magnetism of  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) small clusters have been studied. The calculations show that: the binding energies increase with the number of atoms in the  $Al_n$  cluster; the small-sized  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) clusters can exhibit magnetism though Al is a simple metal, with the magnetic moments change between  $1\mu_B$  and  $2\mu_B$ . From the plot of energy levels, the magnetic moments of spin-polarized  $Al_n$  clusters are discussed. Furthermore, the magnetic moment, the binding energy, the first and second differences of binding energies versus the number of atoms in the clusters are analyzed. The electronic structure and charge density of the most stable cluster  $Al_5$  are also discussed.

2) The structural properties and magnetism of  $W_n$  ( $n = 2-7$ ) small clusters have been studied. The calculations show that: the binding energies increase again with the number of atoms in the cluster; although the bulk tungsten does not show magnetism, some of the small-sized  $W_n$  clusters can exhibit magnetism, i.e., when  $n$  equals to 3, 4 and 7, all with a magnetic moment of  $2\mu_B$ . From the plot of energy levels, the magnetic moments of the spin-polarized  $W_n$  clusters are discussed. Furthermore, the magnetic moment, the binding energy, the first and second differences of binding energies versus the number of atoms in the cluster are analyzed. The electronic

structures and charge density plots of the most stable cluster  $W_4$  are also discussed.

3) The structural properties and magnetism of  $Al_4$  cluster on the NaCl(001) surface have been studied. We calculated the structures, the binding energy, the distance between the lowest Al atoms and the NaCl(001) surface as well as the magnetic moment of the  $Al_4$  clusters on the NaCl(001) surface. The adsorption sites considered are two kinds of bridge sites and hollow sites, the top site of the Na atom as well as the top site of the Cl atom. The results show that  $Al_4$  clusters on the top site of the Na atom is the most stable structure, with the largest binding energy and the smallest distance between the lowest Al atoms and the NaCl(001) surface, however, its magnetic moment is zero. On the other hand, adsorption sites except for the top site of the Na atom can retain the magnetic moments of  $Al_4$  cluster in the free space.

**Key words:** Metal clusters; Magnetism; *Ab initio* calculations

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目 录

摘 要	I
Abstract	II
<b>第一章 绪 论</b>	1
1.1 纳米科学技术	1
1.2 纳米团簇的研究现状	2
1.3 本研究工作的任务和意义	4
参考文献:	5
<b>第二章 计算模拟方法</b>	8
<b>2.1 密度泛函理论</b>	8
2.1.1 Hohenberg-Kohn 定理	8
2.1.2 Hohenberg-Kohn 定理的推广——自旋密度泛函理论	9
2.1.3 Kohn-Sham 方程	10
2.1.4 局域自旋密度近似 (LSDA)	11
2.1.5 广泛梯度近似 (GGA)	12
2.1.6 非共线自旋密度	14
<b>2.2 平面波展开的第一原理赝势法</b>	14
2.2.1 平面波基矢	15
2.2.2 赝势	16
2.2.3 力和 Hellmann-Feynman 定理	20
<b>2.3 VASP 计算程序包</b>	21
参考文献:	22
<b>第三章 简单金属小团簇 <math>Al_n</math> (<math>n=2-7</math>) 的磁性</b>	25
3.1 引 言	25
3.2 计算方法	26
3.3 结果与讨论	26
3.3.1 $Al_n$ 团簇的结构和磁性	26



3.3.2 Al <sub>5</sub> 团簇的电荷密度分析 .....	32
3.4 结 语 .....	34
参考文献: .....	34
<b>第四章 重金属小团簇 W<sub>n</sub> (n=2-7) 磁性的第一原理计算 .....</b>	<b>36</b>
4.1 引 言 .....	36
4.2 计算参数设置 .....	37
4.3 计算结果与讨论 .....	37
4.3.1 自旋极化下 W 团簇的结构和磁性 .....	37
4.3.2 W <sub>4</sub> 团簇的电荷密度分析 .....	43
4.4 小 结 .....	44
参考文献: .....	45
<b>第五章 Al<sub>4</sub>团簇在 NaCl (001) 表面的结构和磁性 .....</b>	<b>47</b>
5.1 引言 .....	47
5.2 计算参数设置 .....	48
5.3 结果与讨论 .....	48
5.4 小 结 .....	56
参考文献: .....	56
<b>第六章 总 结 .....</b>	<b>58</b>
<b>攻读硕士学位期间发表的论文 .....</b>	<b>60</b>
<b>致 谢 .....</b>	<b>61</b>

---

# Contents

<b>Abstract in Chinese.....</b>	<b>I</b>
<b>Abstract in English.....</b>	<b>II</b>
<b>Chapter 1 Introduction.....</b>	<b>1</b>
1.1 On the nanotechnology.....	1
1.2 Background of investigation of nanocluster.....	2
1.3 Motivations and objects of our studies.....	4
Reference.....	4
<b>Chapter 2 Calculation method.....</b>	<b>8</b>
2.1 The density functional theory.....	8
2.1.1 Hohenberg-Kohn theorems.....	8
2.1.2 Extensions of Hohenberg-Kohn theorems-spin polarized DFT.....	9
2.1.3 Kohn-Sham equations.....	10
2.1.4 The local spin density approximation (LSDA).....	11
2.1.5 Generalized-gradient approximations (GGA).....	12
2.1.6 Non-collinear spin density.....	14
2.2 First-principles pseudopotential method.....	14
2.2.1 Plane waves.....	15
2.2.2 Pseudopotentials.....	16
2.2.3 Forces and Hellmann-Feynman theorem.....	20
2.3 VASP software.....	21
References.....	22
<b>Chapter 3 Magnetism of Al<sub>n</sub> (n = 2-7) small clusters.....</b>	<b>25</b>
3.1 Introduction.....	25
3.2 Method of calculations.....	26
3.3 Results and discussions.....	26

3.3.1 The structural properties and magnetism of $Al_n$ clusters.....	26
3.3.2 Charge density analysis of $Al_5$ cluster.....	32
<b>3.4 Conclusions.....</b>	<b>34</b>
<b>References.....</b>	<b>34</b>
<b>Chapter 4 Magnetism of small-sized <math>W_n</math> clusters (n=2-7).....</b>	<b>36</b>
<b>4.1 Introduction.....</b>	<b>36</b>
<b>4.2 Parameters of calculations.....</b>	<b>37</b>
<b>4.3 Results and discussions.....</b>	<b>37</b>
4.3.1 The structures and magnetism of the spin-polarized $W_n$ clusters.....	37
4.3.2 Charge density of $W_4$ cluster.....	43
<b>4.4 Conclusions.....</b>	<b>44</b>
<b>References.....</b>	<b>45</b>
<b>Chapter 5 The structural properties and magnetism of <math>Al_4</math> cluster on the NaCl(001).....</b>	<b>47</b>
<b>5.1 Introduction.....</b>	<b>47</b>
<b>5.2 Parameters of calculations.....</b>	<b>48</b>
<b>5.3 Results and discussions.....</b>	<b>48</b>
<b>5.4 Conclusions.....</b>	<b>56</b>
<b>References.....</b>	<b>56</b>
<b>Chapter 6 Summary.....</b>	<b>58</b>
<b>Appendix Publication List.....</b>	<b>60</b>
<b>Acknowledgements .....</b>	<b>61</b>

## 第一章 绪论

### 1.1 纳米科学技术

纳米科学技术是诞生在 20 世纪 80 年代末并在不断崛起的新科技,它是研究在千万分之一米到十亿分之一米内,原子、分子和其它类型物质的运动和变化的科学;同时在这一尺度范围内对原子、分子等进行操纵和加工的技术。纳米科技正在对人们的生活和社会发展产生重要的影响,并给物理、化学、材料等学科的发展带来了新的机遇。

纳米材料是晶粒结构的尺寸在 100 纳米以下的且具有特殊功能的材料,即三维空间中至少有一维尺寸小于 100nm 的材料或由它们作为基本单元构成的具有特殊功能的材料。纳米材料按维数分可分为三类<sup>[1],[2]</sup>:

- (1) 零维,指在空间三维尺度均在纳米尺度,如纳米尺度颗粒、原子团簇等;
- (2) 一维,指在空间有两维处于纳米尺度,如纳米线、纳米棒、纳米管等;
- (3) 二维,指在三维空间中有一维在纳米尺度,如超薄膜、多层膜、超晶格等。

由于纳米材料尺寸小,与此同时纳米粒子内还存在孪晶界、层错、位错等缺陷,甚至还有不同的亚稳相共存,因此纳米材料具有一些不同于常规材料的特性<sup>[3],[4]</sup>:表面效应,体积效应,量子尺寸效应和宏观量子隧道效应等等。同时纳米材料在光学,电学,热学和力学方面表现出和大块固体相比有了显著不同的性质。

物质在纳米尺度时,会和它们在宏观时有很大的不同,来自于其在纳米尺度下所拥有的量子表面现象,并因此可能可以有許多重要的应用和制造许多有趣的材质。比如,当表面积对体积的比例剧烈地增大时,开起了如催化学等以表面为主的科学的可能性。微小性的持续探究以使得新的工具诞生,如原子力显微镜和扫描隧道显微镜等。

固体物质在粗晶粒尺寸时,有着固定的熔点,而纳米粉末中由于每一粒子组成原子少,表面原子处于不安定状态,使其表面晶格震动的振幅较大,所以具有

较高的表面能，造成超微粒子特有的热性质，也就是熔点下降。实验表明，平均粒子大小为 40nm 的纳米铜粒子的熔点由 1053 °C 降低到 750°C，降低了 300 °C 左右<sup>[5]</sup>。同时纳米粉末将比传统粉末容易在较低温度烧结，而成为良好的烧结促进材料。

一般常见的磁性物质均属多磁区之集合体，当粒子尺寸小至无法区分出其磁区时，即形成单磁区的磁性物质。因此磁性材料制作成超微粒子或薄膜时，将成为优异的磁性材料。利用纳米材料的高矫顽力的性质，已做成高存储密度的磁记录粉，大量应用于磁带、磁盘、磁卡以及磁性钥匙等。

纳米粒子的粒径（10 纳米~100 纳米）小于光波的长，因此将与入射光产生复杂的交互作用，会失去原来的光泽而呈现黑色，尺寸越小，色彩越黑。金属超微粒对光的反射率很低，与金属在真空镀膜形成高反射率光泽面成强烈对比。纳米材料因其光吸收率大的特色，可应用于红外线感测器材料等。

## 1.2 纳米团簇的研究现状

纳米团簇<sup>[6]</sup>是零维的纳米材料，是由几个乃至上千个原子、分子或离子通过物理或化学结合力组成的相对稳定的微观或亚微观聚集体，其物理和化学性质随所含的原子数目而变化。团簇的空间尺度是几埃至几百埃的范围，许多性质既不同于单个原子分子，又不同于固体和液体，也不能用两者性质的简单线性外延或内插得到。因此，人们把团簇看成是介于原子、分子与宏观固体物质之间的物质结构的新层次，是各种物质由原子分子向大块物质转变的过渡状态，或者说，代表了凝聚态物质的初始状态。团簇科学研究的基本问题是弄清团簇如何由原子、分子一步一步演化而成，以及随着这种演化，团簇的结构和性质如何变化，具体当尺寸多大时，过渡成宏观固体。金属团簇是团簇家族中的重要成员，在理论和实验方面都得到了广泛的研究<sup>[7]-[13]</sup>。

目前团簇科学研究的几个主要方向是：（1）研究团簇的组成及电子构型的规律、幻数和几何结构、稳定性的规律；（2）研究团簇的成核和形成过程及机制，研究团簇的制备方法、尤其是获取尺寸均一与可控的团簇束流；（3）研究金属、半导体及非金属和各种化合物团簇的光、电、磁、力学、化学等性质，它们与结

构和尺寸的关系, 及向大块物质转变的关节点; (4) 研究团簇材料的合成和性质; (5) 探索新的理论, 不仅能解释现有团簇的效应和现象, 而且能解释和预知团簇的结构, 模拟团簇动力学性质, 指导实验; (6) 发展新的方法对团簇表面进行修饰和控制。

研究原子团簇和纳米颗粒的电子行为和磁性, 不仅在制备纳米电子元件和高密度磁存储器中有实际应用价值, 而且在物理基础研究中有重要意义。单个原子的磁矩可由电子轨道角动量和自旋量子数精确地确定。固体中长程磁有序不再是单个原子的磁性简单相加, 而是原子间通过库仑相互作用和泡利不相容原理的集体效应<sup>[14]</sup>。这些交换作用可以产生磁矩排序(铁磁性)或反向排序(反铁磁性)或者磁矩更复杂的排列。大块铁磁性金属 Fe、Co、Ni 等的平均原子磁矩分别为  $2.22\mu\text{B}$ 、 $1.6\mu\text{B}$  和  $0.6\mu\text{B}$ <sup>[6]</sup>。对于金属团簇的电子结构和磁性的研究可以更好地理解金属团簇的物理和化学特性。块体时许多金属都没有表现出固有的磁性, 与此不同, 相应的小团簇通常能够表现出净磁矩<sup>[15]-[17]</sup>, 例如: 已有的研究表明, 过渡金属钒和钇在小团簇时都可以有磁矩<sup>[16][17]</sup>。

团簇的科学研究正处于蓬勃发展的阶段, 除去理论上的极大意义之外, 原子团簇在声、电、光、磁等方面的实际应用更是人们努力的方向。对 C, Au, Al, Mg, Hg, Zn, Ni, Si 等各种元素的团簇的研究均有一些有意义的发现<sup>[18]-[23]</sup>。纳米团簇有许多有意义的性质, 如结构、电子、光学、磁性和化学性质在许多领域, 例如纳米催化<sup>[24], [25]</sup>、光电子器件<sup>[26], [27]</sup>、单电子器件<sup>[28]</sup>、超高密度磁性记录<sup>[29]</sup>、量子计算和量子密码术<sup>[32]</sup>中都得到应用。

目前纳米材料的生长和理论研究很多是在物质的表面上进行的。这是因为材料的许多重要的物理性质、化学过程首先发生在表面和界面, 表面结构表现出不同于体材料的光、电、磁和力学性质。例如: 田东旭等研究表明载体对负载型金属团簇的稳定性和扩散性质有明显的影响<sup>[33]</sup>; 表面上有序排列的纳米团簇得到了国内外广泛的研究<sup>[34]-[38]</sup>; 薛其坤领导的研究组用一种“幻数团簇+纳米模板”的生长方法成功地制备了尺寸相同、空间分布均匀的金属纳米团簇阵列<sup>[38]</sup>等等。

### 1.3 本研究工作的任务和意义

团簇广泛存在于自然界和人类的实践活动中，涉及到许多物质运动过程和现象，如催化、燃烧、晶体生长、成核和凝固、相变、溶胶、薄膜形成和溅射等，构成物理学和化学两大学科的一个交叉点，成为材料科学新的生长点。一些金属的体材料没有磁性，但是作为团簇由于空间尺度只有几埃到几百埃，经常会与块体金属不同，能够表现出的磁矩。

铝作为简单金属，价电子中只有  $s$ -、 $p$ -电子，并不含  $d$ -电子，其体材料并不能表现出磁性。我们使用自旋极化的密度泛函理论下的第一原理方法，对简单金属铝的小团簇  $Al_n$  ( $n = 2-7$ ) 的结构特性和磁性进行了理论计算，结果表明，铝的小团簇具有磁性。通过能级图分析了  $Al_n$  团簇磁矩的变化规律，此外还分析了  $Al_n$  团簇的磁矩，结合能，能量的一阶和二阶差分随原子数  $n$  的变化情况。此外我们还用第一性原理方法研究在  $NaCl(001)$  表面上不同位置有序排列的  $Al_4$  团簇的结构和磁性。

钨是一种性质特殊的重金属，具有极高的熔点，低蒸汽压，高温下低膨胀和尺寸稳定性，优异的高温力学性能和特殊的电性，它的纳米结构有特别的性质。我们使用自旋极化的密度泛函理论下的第一原理方法，对重金属钨的小团簇  $W_n$  ( $n = 2-7$ ) 的结构特性和磁性进行了理论计算，另外还分析了  $W_n$  团簇的磁矩，结合能，能量的一阶和二阶差分随原子数  $n$  的变化。

通过对这些材料纳米磁性的研究和比较，能够积累数据，帮助人们更深入地理解结构，组分和磁性的关系，为磁性的开发和应用准备重要的理论基础，对磁性理论的发展也可以提供参考。此外，我们从理论上研究惰性衬底表面上团簇的结构和磁性也可以对理解表面上团簇的形成以及相关的物理化学性质有帮助。希望我们的研究有助于低维纳米体系的物理机制的理解，并为其实验研究提供有价值的信息。

## 参考文献:

- [1] 张立德, 牟季美. 纳米材料和纳米结构[M]. 北京: 科学出版社, 2001, 1-50.
- [2] 张志昆, 崔作林. 纳米技术与纳米材料[M]. 北京: 国防工业出版社, 2000, 6-58.
- [3] 陈改荣. 纳米材料的特性及进展[J]. 平原大学学报, 2000, 17(4): 4143.
- [4] 张立德, 牟季美. 开拓原子和物质的中间领域——纳米微粒与纳米固体[J]. 物理, 1992, 21(3): 167-173.
- [5] Zhang Z. K., Cui Z. L., Chen K. Z., *et al.*, Structure of nano-conductive fibers[J]. Chinese Science Bulletin. 1997, 42, 1535-1537.
- [6] 王广厚. 团簇物理学[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2003.
- [7] Yang S. Y., Drabold D.A., Adams D. A., *et al.* A first principle local orbital density functional study of Al clusters [J]. Phys. Rev. B, 1993, 47: 1567.
- [8] Wang J, Wang G, Zhao J. Density-functional study  $Au_n$  ( $n=2-20$ ) clusters: lowest energy structures and electronic properties [J]. Phys. Rev. B, 2002, 66: 035418.
- [9] 洪家岁, 王娴, 谭凯等. 锰团簇  $Mn_5$  和  $Mn_6$  几何结构与磁性的分析[J]. 化学学报, 2006, 64: 1063.
- [10] 张蓓, 段海明, 张军.  $Rh_n$ 、 $Co_n$  ( $n = 3 \sim 56$ ) 团簇的结构特性研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2007, 27: 63.
- [11] 林秋宝, 李仁全, 文玉华, 朱梓忠.  $W_n$  ( $n=3-27$ ) 原子团簇结构的第一性原理计算[J]. 物理学报, 2008, 57: 181.
- [12] Lee G. H., Huh S. H., Park Y. C., *et al.* Photoelectron spectra of small nanophase W metal cluster anions [J]. Chem. Phys. Lett., 1999, 299: 309.
- [13] Oh S. J., Huh S. H., Kim H. K., *et al.* Structural evolution of W nano-clusters with increasing cluster size [J]. J. Chem. Phys., 1999, 111: 7402.
- [14] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1983.
- [15] Reddy B. V., Khana S. N., Dunlap B. I. Giant Magnetic Moments in 4d Clusters [J]. Phys. Rev. Lett., 1993, 70: 3323.
- [16] Alvarado-Leyva P. G., Sosa Hernández E. M., *et al.* Magnetic properties of small vanadium clusters [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2004, 369:52-54.



Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库