

本期封面



2006年12

栏目: 12

DOI:

论文题目: V12M团簇的电子结构和磁性的第一性原理研究

作者姓名: 袁宏宽, 陈洪

工作单位: 西南大学物理科学与技术学院

通信作者: 袁宏宽

通信作者Email: yhk10@swu.edu.cn

文章摘要: 采用密度泛函理论框架下的广义梯度近似(DFT/GGA), 对V13团簇及V12M掺杂团簇(M=Sc, Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru)的电子结构和磁性进行研究. 通过对团簇的基态几何构型优化计算得到了团簇束缚能、电子结构以及磁矩的大小, 系统地分析了V13和V12M团簇磁矩的形成机理以及电子结构与磁性的变化关系. 发现掺杂团簇V12Fe和V12Ru为具有大束缚能和大能隙间隔的闭壳电子结构, V12Y团簇具有11 m B的大磁矩, 而其它掺杂团簇则表现为弱磁性.

关键词: 钒团簇; 密度泛函理论; 电子结构; 磁性

分类号: 0562.1, 0482.52

关闭