

[首页](#) | [期刊介绍](#) | [编辑部信息](#) | [投稿须知](#) | [下载专区](#) | [英国物理学会](#) | [联系我们](#) | [最新消息](#) | [English](#)

分子基磁体 $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ 电子结构和半金属性的第一性原理研究
First Principles Study of Electronic Structure and Half-metallicity of Molecule-based Ferromagnet $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$

摘要点击 323 全文点击 109 投稿时间: 2010-12-15 采用时间: 2011-2-14

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/02/189-193

中文关键词 [第一性原理](#) [磁性](#) [半金属性](#)

英文关键词 [First principles](#) [Magnetic property](#) [Half-metallic property](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
黄海铭*	湖北汽车工业学院理学院系, 十堰442002	smilehnm@163.com
罗时军	湖北汽车工业学院理学院系, 十堰442002	
刘国营	湖北汽车工业学院理学院系, 十堰442002	
姚凯伦	华中科技大学物理学院, 武汉430074 ; 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳110016	

中文摘要

基于第一性原理方法结合广义梯度近似, 研究了分子基磁体 $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ 的电子结构和半金属性. 对总能量, 自旋极化的能带结构, 态密度以及自旋磁矩的计算表明该分子磁体为半金属铁磁体. 每个分子的总磁矩为 $2.00\mu\text{B}$, 其中 Cr^{2+} 对分子磁矩的贡献较大, 而配位体上的碳原子和氮原子的贡献相对较小. 讨论了当晶格常数发生小幅变化时材料半金属性的变化.

英文摘要

The electronic structure and half-metallicity of molecule-based ferromagnet $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ have been investigated using first-principles with generalized gradient approximation. The total energy, spin-polarized electronic band structure, density of states (DOSs) and spin magnetic moments were all calculated. The calculations reveal that the compound $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ is a really half-metallic ferromagnet with a integral magnetic moment of $2.0000\mu\text{B}$ per molecule in the optimized lattice constant. Based on the spin distribution and the DOS, it is found that the total magnetic moment is mainly from the Cr^{2+} with relative small contribution from C and N atoms. The sensitivity of the half-metallicity to small change in lattice constant is also discussed.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
 主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
 联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计