

C60掺杂物超导性EHMO晶体轨道研究

曹阳,冯建文,滕有西,陈文建,陈良进

苏州大学化学系;扬州大学化学系;波士顿大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文对晶态C60, K3C60, K6C60, Rb3C60, Rb6C60, RbCs2C60, Rb2CsC60, KRb2C60, K2RbC60, K2CsC60, Na2CsC60, Li2CsC60, Na2RbC60, Na2KC60

进行了EHMO三维晶体轨道的能带结构计算。计算结果除了得到能带结构外,还得到了这类掺杂物的总态密度,原子与轨道净电荷,晶体轨道矢量,

单胞内外原子与轨道投影态密度等。利用上述结果不仅可以从理论上说明A3C60的超导性以及C60和A6C60的绝缘性;而且还得到 $\ln(1/T_c)$ 和 $-1/NE_f$ 之间一种近似的线性关系,这个结论与BCS理论的预测非常吻合。

关键词 [钾化合物](#) [掺杂](#) [能带结构](#) [超导性](#) [晶体轨道](#) [铷化合物](#) [富勒烯](#)

分类号 [0641](#)

EHMO crystal orbital studies on superconductivity of doped C60

CAO YANG, FENG JIANWEN, TENG YOUXI, CHEN WENJIAN, CHEN LIANGJIN

Abstract The three dimensional EHMO crystal orbital calculations on the crystallines C60, K3C60, K6C60, Rb3C60, Rb6C60, RbCs2C60, Rb2CsC60, KRb2C60, K2RbC60, K2CsC60, Na2CsC60, Li2CsC60, Na2RbC60, Na2KC60 were reported. The calculation results include the band structures, density of states, net charge of both atoms and orbitals, crystal orbital vectors, various overlap populations between different atoms and different orbitals within or outside unit cells and various projected density of states. All these useful informations could not only explain the superconductivity of A3C60 (a represents alkalimetal), but also show explicitly the insulating character of both undoped C60 and full doped C60.

Key words [POTASSIUM COMPOUNDS](#) [DOPE](#) [BAND STRUCTURES](#) [SUPERCONDUCTIVITY](#) [CRYSTAL ORBIT](#) [RUBIDIUM COMPOUNDS](#) [FULLERENES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(368KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“钾化合物”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [曹阳](#)
- [冯建文](#)
- [滕有西](#)
- [陈文建](#)
- [陈良进](#)