

## TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>电子结构的第一性原理研究

# First-principles Study on the Electronic Structure of Novel Titanium Yttrium Mixed-metal Nitride Clusterfullerene

摘要点击 265 全文点击 117 投稿时间: 2011-5-25 采用时间: 2011-6-3

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/04/439-443

中文关键词 [TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>](#) [电子结构](#) [载流子掺杂](#) [化学修饰](#) [第一性原理计算](#)

英文关键词 [TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>](#) [Electronic structure](#) [Doping](#) [Chemical modification](#) [First-principles calculation](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
<a href="#">李淑娟</a>	<a href="#">中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥230026</a>	
<a href="#">类淑来</a>	<a href="#">中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥230026</a>	
<a href="#">黄静</a>	<a href="#">安徽建工学院材料与化工学院, 合肥230022</a>	
<a href="#">李群祥*</a>	<a href="#">中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥230026</a>	liqun@ustc.edu.cn

中文摘要

采用第一性原理方法研究了TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>分子的几何、振动和电子性质。理论计算结果表明TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>分子的电子结构性质明显与Sc<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub>和Y<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub>的不同, 而与TiSc<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>相近。对TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>分子进行载流子掺杂时, 其磁性

英文摘要

We present a first-principles study on the geometric, vibrational and electronic properties of a novel Y-based non-scandium mixed-metal nitride clusterfullerene (TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>). Theoretical results indicate that the fundamental electronic properties of TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub> are similar to that of TiSc<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub>, but dramatically different from that of Sc<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub> and Y<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub> molecules. We find that the magnetism of TiY<sub>2</sub>N@C<sub>80</sub> is quenched by carrier doping. The rotation energy barrier of the TiY<sub>2</sub>N cluster in C<sub>80</sub> cage was obviously increased by exohedral chemical modification with pyrrolidine monoadduct.

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](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计