

晶态Ca₃C₆₀与Ca₅C₆₀的能带结构研究

曹阳, 陈良进, 陈波, 冯建文

苏州大学化学系|苏州 215006

摘要:

用三维EHMO晶体轨道程序分别对Ca₃C₆₀, Ca₅C₆₀进行了能带结构的计算. 计算结果表明, Ca₃C₆₀没有导电性, 能隙约为0.9eV; 而在Ca₅C₆₀的能带结构中, 费米面刚好穿过半满带, 表明Ca₅C₆₀是导体; 同时在费米面附近有较大的态密度值, 表明Ca₅C₆₀与K₃C₆₀等类似, 具有较高的超导转变温度. 电荷分析表明, 在这两种情况下, 钙原子的4s电子基本上全转移到C₆₀上, C₆₀分子可形成一个稳定的带6到10个电子的负离子.

关键词: 掺杂C₆₀ 能带结构 EHMO

收稿日期 1994-01-03 修回日期 1994-03-15 网络版发布日期 1995-02-15

通讯作者: 曹阳 Email:

本刊中的类似文章

1. 林宪杰;徐龙君.掺杂和取代对聚苯胺导电性能影响机制的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 152-155
2. 董俊华;宋光铃;曹楚南;林海潮.铁电极上硫脲及衍生物的缓蚀作用研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 252-258
3. 吴雄;苏克和.氧化锡表面的原子簇模型计算[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 357-360
4. 刘春万;王文亮;李隽.簇合物中锥形四重桥硫3d轨道成键的EHMO研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(02): 130-134
5. 颜顺启;张启元;严继民.固相二乙炔拓扑聚合及侧基效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 26-32
6. 林伟;章永凡;李奕;陈勇;李俊箴.SnO₂(110)弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 76-81
7. 章永凡;李俊钱;丁开宁;陈文凯;周立新.过渡金属碳化物(111)面电子结构的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 40-45
8. 倪碧莲, 蔡亚萍, 李奕, 丁开宁, 章永凡.不同覆盖度下Li原子在Si(001)表面上的吸附构型和电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1535-1544
9. 干琴芳;倪碧莲;李奕;丁开宁;章永凡.CO分子在TiC(001)表面上的吸附构型与电子结构[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1850-1858
10. 刘盛;张琦锋;许北雪;吴锦雷.纳米稀土-介质薄膜光电发射光谱和能带结构 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 213-217
11. 李淑瑾;曹阳;冯建文;施卫平;周伟群.聚吡咯、聚甲基吡咯电子能带结构的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 890-894
12. 张启元;严继民;张大仁.聚二乙炔电子能带结构的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 256-262
13. 曹阳;刘坚.双Ti-O层Ti-Ba-Ca-Cu氧化物超导体的能带结构[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 445-451
14. 曹阳;王友良;陈波.聚丁二炔的能量和能带结构计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 174-177

扩展功能

本文信息

PDF(713KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 掺杂C₆₀

▶ 能带结构

▶ EHMO

本文作者相关文章

▶ 曹阳

▶ 陈良进

▶ 陈波

▶ 冯建文