

论文

Mo原子嵌入对C36结构和性能的影响

王丽平 韩培德 贾虎生 许并社

摘要:

用密度泛函方法采用GGA/PW91基组对具有D6h对称性的C36及其衍生物Mo@C36进行结构优化和性能计算,研究Mo@C36稳定构型、存在的可能性及稳定性,以及Mo掺杂对C36结构及性能的影响.结果表明,Mo位于C36主轴上偏离中心约0.1 nm时,Mo@C36能量最低,结构最稳定;Mo掺杂引起笼的局部畸变,但Mo@C36仍保持完整笼型结构,其稳定性比C36有所提高.Mo原子嵌入C36使其禁带宽度增大,导电性及化学反应活性降低;费米能级下降,但仍处于禁带之间,二者均属半导体性质的材料.C36结构及性能的变化与Mo所处的位置及Mo与C36笼之间的电子迁移有关.

关键词:

Abstract:

Keywords:

收稿日期 1900-01-01 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期 2006-08-25

DOI:

基金项目:

通讯作者: Email:

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="5703"/>
<input type="text"/>			

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (565KB)

[HTML全文]

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

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

本文作者相关文章

▶ 王丽平

▶ 韩培德

▶ 贾虎生

▶ 许并社

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by