

Sc_nN (n=2~12) 团簇的磁性和热容量研究^①

龙 晓 霞

重庆文理学院 电子电气工程学院, 重庆 永川 402160

摘要: 基于第一性原理, 在密度泛函理论框架下, 用广义梯度近似方法计算了团簇 Sc_nN (n=2~12) 的总磁矩 M_T、与 N 原子最近邻的 Sc 原子的局域磁矩 M_{Sc}、掺杂原子 N 的局域磁矩 M_N。从原子相互作用角度出发, 应用统计物理理论, 计算了团簇 Sc_nN 的磁矩和热容量, 研究了它们随温度的变化规律。结果表明: Sc_nN 团簇的磁性与团簇的构型、原子相互作用、磁性粒子间的磁相互作用、团簇中的 Sc 原子数 n 有关。总磁矩随 Sc 原子数 n 呈波动性变化, 当 n=3, 8, 9, 11, 12 时, 总磁矩为零, 团簇的磁性消失; 当 n=2, 4, 5, 6, 7, 10 时, 团簇表现为铁磁性, 其中当 n=6 时, 团簇的磁性最强。Sc_nN 团簇的磁矩随温度升高而减小, 其变化趋势与块状磁体类似。温度较低时, 磁相互作用产生的热容量 C_M 随温度升高而增大, 在某温度附近取极大值; 原子相互作用产生的热容量 C_V 在温度较低时与温度成正比, 和块状磁体的 C_V 与温度的三次方成正比不同; 在对团簇的热容量的贡献中, 原子相互作用占主要。

关键词: Sc_nN 团簇; 磁矩; 热容量; 原子相互作用; 温度

中图分类号: O49

文献标志码: A

掺杂团簇由于电子结构、几何构型、化学反应活性等性质的可裁剪性和广泛的应用前景, 已成为人们的重要研究对象。其中过渡金属掺杂团簇由于其在理论研究中的重要性和潜在的应用价值, 已有一些文献对它进行了研究^[1]。在过渡金属掺杂团簇的研究中, 用 N 作掺杂物质的相关研究较多, 其中最为常见的是在 Al 团簇中掺杂 N^[2-3]。文献[4-5]研究了用 N 掺杂 Ga 的 Ga_nN_m⁺ (n=1~8, m=1~2) 团簇的结构及稳定性; 最近文献[6]研究了 Zr_nFe (n=2~13) 团簇的几何结构及其磁性, 而文献[7]对掺杂 3d 过渡金属元素 Al 的 Sc_nAl (n=1~8, 12) 团簇进行了研究, 但有关 N 掺杂 Sc 团簇的研究甚少。由于 Sc 的电子轨道与 Ga 等类似, 在催化和吸附等方面具有更优越的性能, N 掺杂 Sc 团簇的结构和性质就是一个待研究的问题。文献[8]基于第一性原理, 在密度泛函理论框架下, 用广义梯度近似方法, 对 Sc_nN (n=2~12) 团簇的结构和稳定性进行了研究, 但未探讨团簇磁性和热容量等问题。为此, 本文将分别用广义梯度近似法和统计物理理论方法对 Sc_nN (n=2~12) 团簇的磁性和热容量进行研究。

1 Sc_nN (n=2~12) 团簇的基态构型

文献[8]采用密度泛函理论(DFT)中的广义梯度近似(GGA)对 Sc_nN (n=2~12) 团簇的各种同分异构体结构进行了优化, 并对电子结构进行了计算, 求得了束缚能等性质。全部构型优化和电子结构计算均采用 DMOL 软件包。在广义梯度近似(GGA)中, 选择 Becke 的交换梯度修正和 Perdew 的关联梯度(BP)修正, 采用带极化的双数值原子基组(DNP)完成全电子自旋无限制的计算。几何优化的收敛标准设置为能量梯度 10⁻³ eV/nm 和原子位移 5×10⁻⁵ nm, 电荷密度收敛于 10⁻⁸, 总能量收敛于 10⁻⁶ eV。得出的几种稳定的不同尺寸团簇的基态构型见图 1。

2 Sc_nN (n=2~12) 团簇的磁性

块状的 Sc 表现为顺磁性, 文献[7]的实验表明: 纯 Sc 团簇也表现出顺磁性。采用密度泛函理论(DFT)

① 收稿日期: 2011-09-08

基金项目: 重庆文理学院科学技术研究项目(Y2007WX39)。

作者简介: 龙晓霞(1965-), 女, 重庆永川人, 副教授, 主要从事凝聚态物理的研究。

中的广义梯度近似(GGA),对 Sc_nN 团簇的上述 11 种基态结构的总磁矩 M_t 、最近邻 N 原子的 Sc 原子所带的电荷 Q_{Sc} 、局域磁矩 M_{Sc} 、掺杂原子 N 所带的电荷 Q_{N} 和局域磁矩 M_{N} 进行计算,结果见表 1.

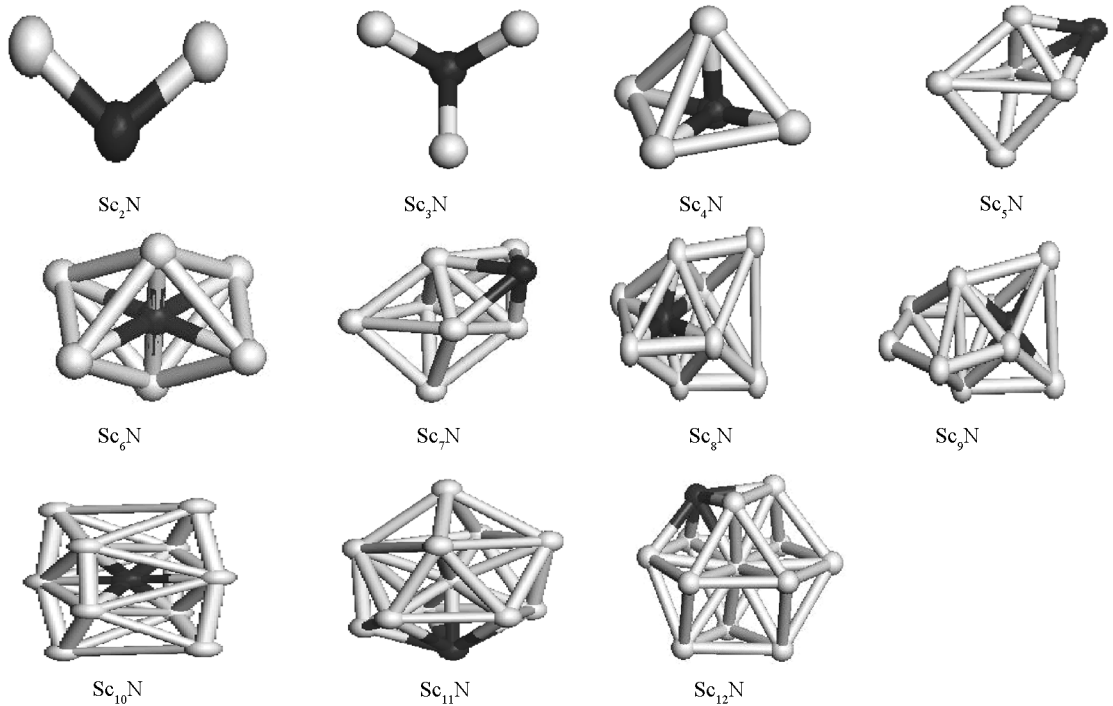


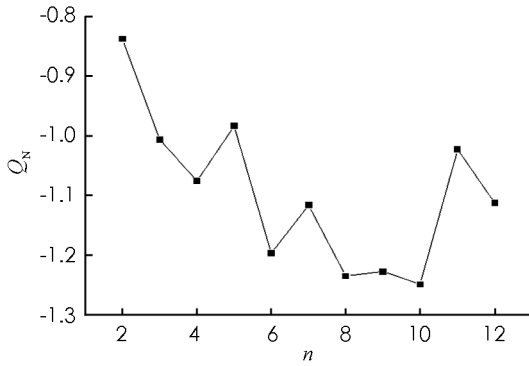
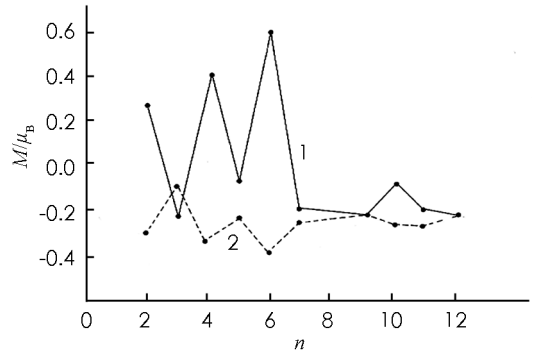
图 1 Sc_nN ($n=2\sim 12$) 团簇的基态构型

表 1 Sc_nN ($n=2\sim 12$) 团簇基态结构的 M_t (μ_{B}), Q_{Sc} (C), M_{Sc} (μ_{B}), Q_{N} 和 M_{N} (μ_{B})

团簇	M_t	Q_{Sc}	M_{Sc}	Q_{N}	M_{N}
Sc_2N	0.5	0.418	0.5	-0.837	-0.052
Sc_3N	0	0.335	-0.005	-1.006	0.015
Sc_4N	3	0.288	0.632	-1.075	-0.119
Sc_5N	2	0.351	0.160	-0.983	-0.037
Sc_6N	5	0.189	0.807	-1.196	-0.149
Sc_7N	2	0.259	-0.017	-1.116	-0.029
Sc_8N	0	0.190	0	-1.235	0
Sc_9N	0	0.256	0	-1.227	0
Sc_{10}N	2	0.267	0.150	-1.249	-0.021
Sc_{11}N	0	0.364	0.022	-1.022	-0.023
Sc_{12}N	0	0.252	0	-1.112	0

由表 1 看出,当 $n=3,8,9,11,12$ 时,团簇的磁矩 M_t 为零,团簇的磁性消失;而当 $n=2,4,5,6,7,10$ 时,团簇表现为顺磁性,其中当 $n=6$ 时,团簇的磁性最强.还看出,N 原子提供的磁矩 M_t 非常小;除 $n=4,6$ 外,最近邻 N 原子的 Sc 原子提供的磁矩 M_{Sc} 也很小.另外,从表 1 数据可知,掺杂原子 N 所带的电荷 Q_{N} 都是负值,而 Sc 原子所带的电荷 Q_{Sc} 总为正,即电子总是从 Sc 原子向 N 原子转移,说明 Sc_nN ($n=2\sim 12$) 团簇中 Sc—N 主要表现为离子键性质.

图 2 给出了 Sc_nN 团簇的掺杂 N 原子的电荷 Q_{N} 随 Sc 的原子个数 n 的变化,而图 3 给出了 Sc_nN 团簇的局域磁矩 M_{N} 和 M_{Sc} 随 Sc 的原子个数 n 的变化.可看出: Sc_nN 团簇的掺杂 N 原子的电荷数 Q_{N} 以及局域磁矩 M_{N} 都随 Sc 的原子个数 n 的增多而成波动特征.其中 n 在 2~12 之间时,掺杂 N 原子的电荷数出现周期性的奇偶性的波动;而 n 在 2~7 之间时,掺杂 N 原子的局域磁矩 M_{N} 也出现周期性的奇偶性的波动, n 为奇数时的局域磁矩 M_{N} 较大, n 为偶数时的局域磁矩较小;当 n 在 7~12 变化时, M_{Sc} 同样出现起伏变化,但波动较小,其中当 $n=8,9$ 和 $n=10,11$ 时近似为对称性变化;当 $n=3$ 时局域磁矩最大,当 $n=6$ 时局域磁矩最小.

图 2 $Sc_n N$ 团簇的局域电荷 Q_N 随原子数 n 的变化1. M_N 随 n 的变化; 2. M_{Sc} 随 n 的变化.图 3 $Sc_n N$ 团簇的局域磁矩随原子数 n 的变化

3 团簇的相互作用能

3.1 团簇的原子相互作用能

$Sc_n N$ 团簇内的 Sc 为过渡元素, Sc 原子是具有一定磁矩的顺磁性粒子. 团簇内粒子的相互作用包括原子相互作用和磁性粒子间的磁相互作用. 其中原子相互作用能包括中心 N 原子与周围的 Sc 原子相互作用 U_{NS} 和 Sc 原子之间的相互作用 U_{SS} . 磁相互作用能包括 Sc 原子磁矩 M_{Sc} 与中心原子磁矩 M_N 的磁相互作用能 U_{NSM} 和 Sc 原子磁矩之间的磁相互作用能 U_{SSM} . 因此, 团簇的相互作用能 U 为

$$U = U_{NS} + U_{SS} + U_{NSM} + U_{SSM} \quad (1)$$

Sc 为过渡元素原子, 按文献[9], Sc 原子之间的原子相互作用势遵从万势:

$$\varphi(r_{ij}) = \frac{g_{ij}}{r_{ij}} \left\{ \exp\left[-\frac{2n(r_{ij} - r_{0ij})}{\lambda_D}\right] - 2 \exp\left[-\frac{n(r_{ij} - r_{0ij})}{\lambda_D}\right] \right\} \quad (2)$$

式中: g_{ij} 是第 i 与第 j 个原子之间的成键相关量, 由文献[12]给出; r_{ij} 与 r_{0ij} 分别表在非平衡和平衡时第 i 与第 j 个原子之间的距离; n 为键强参数, 由理论公式算出; λ_D 为德拜波长, 大小为

$$\lambda_D = 4 \left(\frac{\pi F_c}{6} \right) a \quad (3)$$

式中: F_c 为每个原子所占的晶胞数, a 为晶格常数.

$Sc-N$ 为过渡金属元素原子的化合物. N 与 Sc 原子之间的原子相互作用势为^[10].

$$\varphi_2(r_{ij}) = 23.0618 I(\Delta n_c) e^{-(\Delta n_c + 0.693)} - 23.0618 y \Delta n'_c e^{-(\Delta n'_c + 0.68)} -$$

$$\left\{ \sum_y \bar{B}_a \frac{I_j n_j}{D(n_j)} \bar{F}_a + \bar{B}_l \frac{n_l}{D(n_l)} f' - b_a a m^{3d} - b_a C W \right\} \quad (4)$$

式中: $I(\Delta n_c)$ 为电离电子数为 Δn_c 时的离解能; 等式右边第二项为类亲合能修正量(其中 y 为亲合能); \bar{B}_a, \bar{B}_l 为屏蔽系数; \bar{F}_a 为结合因子; CW 项反映磁电子和电子对相互作用能的削弱作用, 这里的 $C = 0.907 P$, P 反映哑对电子和磁电子成键过程中下沉的影响, 对 Sc , P 取 6; W 等于磁电子数和上哑对电子数之和与外壳电子数之比; $a m^{3d}$ 反映了磁电子对相互作用能的微弱贡献, $a = 1.542$, m^{3d} 为磁电子数; 而 f' 为晶格电子的成键能, 通常都取 $f' = 1$. 至于式中其它项可由文献[10]求得.

取中心 —— N 原子为坐标原点, 第 i 与第 j 个 Sc 原子的位置矢量为 r_i, r_j , 则 N 原子与 Sc 原子的原子相互作用能 U_{NS} 和 Sc 原子之间的原子相互作用能 U_{SS} 分别为:

$$U_{NS} = \sum_i \varphi(r_i) \quad U_{SS} = \sum_{ij} \varphi(r_j - r_i) \quad (5)$$

式中的求和是指对团簇内所有 Sc 原子求和.

3.2 团簇原子磁相互作用能

按照电磁学理论, 具有磁矩为 m 的磁性粒子在周围空间位矢为 r_i 的点的磁感应强度为

$$B_i = -\mu_0 \nabla \frac{m \cdot r_i}{4\pi r_i^3} \quad (6)$$

磁场强度 $H_i = B_i / \mu_0$, 在该点处具有磁矩 m_i 的磁性粒子与磁场的磁相互作用能为

$$E_{m_i} = -m_i \cdot H_i = \mu_0 m_i \cdot \nabla \frac{m \cdot r_i}{4\pi r_i^3} \quad (7)$$

进而得到:

$$U_{\text{NSM}} = \mu_0 \sum_i m_i \cdot \nabla_i \left(\frac{m \cdot r_i}{4\pi r_i^3} \right) \quad (8)$$

$$U_{\text{SSM}} = \mu_0 \sum_{ij} m_i \cdot \nabla_{ij} \left[\frac{m_j \cdot (r_i - r_j)}{4\pi |r_j - r_i|^3} \right] \quad (9)$$

(8)、(9) 式中的求和是对团簇内所有 Sc 原子求和。

当温度不高时, 原子振动可忽略, 这时团簇的能量 E 为静止能 E_0 与相互能 U 之和, 即 $E = E_0 + U$, 由 (1) 得到

$$E = E_0 + U_{\text{NS}} + U_{\text{SS}} + U_{\text{NSM}} + U_{\text{SSM}} \quad (10)$$

4 团簇的磁矩和热容量随温度的变化

按照统计物理理论, 团簇的配分函数 Z 是温度等的函数. 当温度不高时, 原子相互作用与磁相互作用彼此独立, 因而配分函数 Z 可认为是原子相互作用的配分函数 Z_A 与磁相互作用配分函数 Z_M 的积, 即

$$Z = Z_A \cdot Z_M \quad (11)$$

其中

$$Z_A \approx \sum e^{-\beta(E_0 + U_{\text{NS}} + U_{\text{SS}})}, \quad Z_M = \sum e^{-\beta E_{m_i}}$$

式中: $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B 为玻尔兹曼常数. 设位矢为 r_i 一个磁性粒子的平均磁矩为 m_i , 它与其它粒子的相互作用能 E_i 为

$$E_i = \sum_j \varphi(r_{ij}) + \sum_j (-H_{ij} \cdot m_i) \quad (12)$$

由 (7) 和 (11) 式求得团簇的总磁矩 M 为

$$M = \frac{1}{Z_M} \sum m_i e^{-\beta E_{m_i}} \quad (13)$$

由热力学理论求得团簇的自由能 F 和热容量 C 分别为

$$F = -k_B T \ln Z = F_A + F_M \quad (14)$$

$$C = C_M + C_V \quad (15)$$

其中: F_A, F_M 和 C_V, C_M 分别是原子相互作用与磁矩相互作用对团簇的自由能 F 和热容量 C 的贡献:

$$F_A = -k_B T \ln Z_A, \quad F_M = -k_B T \ln Z_M \quad (16)$$

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 F_A}{\partial T^2} \right)_V, \quad C_M = -T \left(\frac{\partial^2 F_M}{\partial T^2} \right)_M \quad (17)$$

由 (11) - (17) 式可得到团簇的总磁矩 M 、热容量 C_M 和 C_V 。

4.1 团簇的总磁矩 $M_i(\mu_B)$ 随温度的变化

文献[8]给出图 1 所示的几种基态构型的结构和基态键长以及静止能 E_0 的数据(表 1). 每个原子平均磁矩就等于局域磁矩(数据见表 1). 设对称轴方向为 z 轴, 单位矢量为 e_k , 由图 1 和表 1 的数据, 可确定出第 i 个原子受到其它原子的磁相互作用能为

$$E_{m_i} = \sum_j [-\mu_0 m_i \cdot \nabla \left(\frac{m_j \cdot r_{ij}}{4\pi r_{ij}^3} \right)] \quad (18)$$

式中: r_{ij} 是 i 原子到第 j 个原子的位置矢量. 将表 1 的数据代入 (18) 式后再代入 (13) 式, 结合具体结构作计算, 得到团簇总磁矩 M 随温度 T 的变化曲线见图 4. 由图 4 看出: 总的讲, 各团簇的总磁矩随温度升高而减小. 其中, 当温度较低时, 变化较快; 而当温度较高(如 $T > 250$ K)时, 变化较慢; 当温度更高($T > 400$ K)时, 总磁矩几乎不随温度而变化, 这种变化趋势与块状顺磁性磁体的磁矩随温度的变化类似.

比较图 4 与表 1 数据可以看出: 在 $T = 0$ K 的温度下, 两种方法的结果相近. 例如, 对 Sc_4N 团簇, 用广义梯度近似方法计算的磁矩为 $M_i = 3\mu_B$, 而用统计方法算得的结果为 $M_i = 3.2\mu_B$. 但是, 用广义梯度近似方法只能算出 $T = 0$ K 下的磁矩, 要算出其它温度的磁矩, 则必须重新设定参数. 要反映团簇磁矩随温度的变化, 则要经无限多次的计算, 显然是极其困难的. 而采用传统的统计物理方法, 则只要确定出具体相互作用势形式, 就可以从解析计算公式出发, 较快得到团簇磁矩随温度的变化曲线.

表 1 各种基态构型及其平均键长和静止能

基态构型	对称性	Sc—N 键键长 / $\times 10^{-10}$ m	Sc—N 键数	Sc—Sc 键键长 / $\times 10^{-10}$ m	Sc—Sc 键数	静止能 E_a (er)
Sc ₂ N	C _{2v}	1.830				-33.026
Sc ₃ N	C _{3v}	1.972	3			-29.108
Sc ₄ N	C _{2v}	2.061	4	2.912	5	-34.551
Sc ₅ N	C _s (m)	2.000	3	3.00	9	-37.752
Sc ₆ N	C _{4h}	2.108	6	3.003	10	-36.732
Sc ₇ N	C _s	2.093	4	3.522	15	-41.341
Sc ₈ N	C _{2v}	2.121	6	2.989	20	-35.235
Sc ₉ N	C _{2v}	2.139	6	3.028	18	-40.438
Sc ₁₀ N	C _{2h}	3.209	6	2.125	26	-41.002
Sc ₁₁ N	C _s (m)	3.013	31	3.856	6	-39.220
Sc ₁₂ N	C _{2h}	3.015	30	3.926	8	-41.842

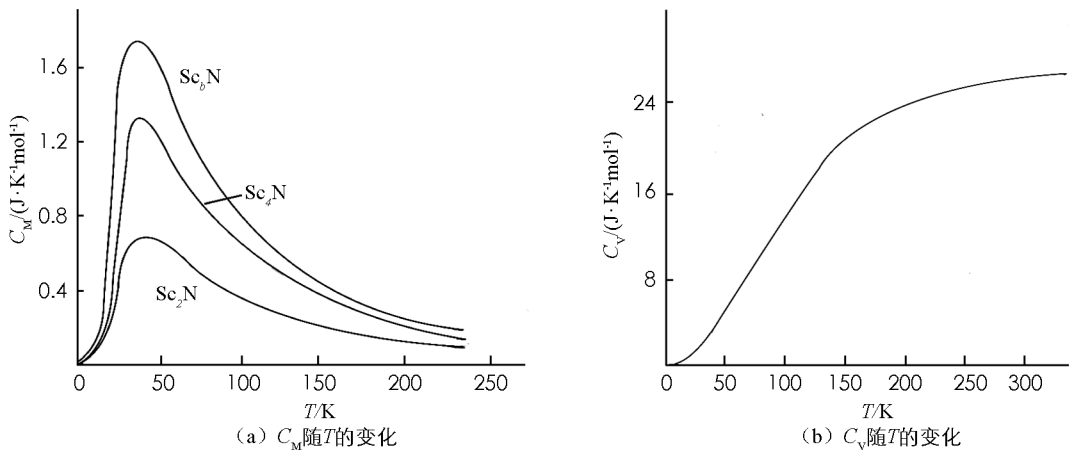
4.2 团簇的热容量随温度的变化

团簇的热容量 C 包括原子相互作用贡献的热容量 C_V 和磁相互作用贡献的热容量 C_M . 原子相互作用势 $\varphi(r_{ij})$ 包括 N—Sc 原子相互作用势 $\varphi_1(r_{ij})$ 和 Sc—Sc 原子相互作用势 $\varphi_2(r_{ij})$. 其中 Sc—Sc 原子相互作用由(2)式表示, 而 N—Sc 原子相互作用由(4)式表示. 文献[6]给出 Sc 的晶格常数 $a = 3.31 \times 10^{-10}$ m, hcp 结构, 晶胞结构因子 $F_C = \frac{1}{3}$. 由(3)

式求得德拜波长 $\lambda_D = \frac{4}{6} \pi F_C a$; g_{ij} 由文献[9]查得: $g_{ij} = 1$;

对金属键强参数 $n=2$. 其余参数选取见文献[10]. 利用上述数据和表 1 的数据, 并结合各团簇的具体结构, 由(11)到

(17)式, 得到 Sc_nN 团簇磁相互作用贡献的热容量 C_M 随温度 T 的变化如图 5(a) 所示, 而原子相互作用贡献的热容量 C_V 随温度 T 的变化如图 5(b). 由图 5 看出: ① 温度较低时, 磁相互作用产生的热容量 C_M 随温度升高而增大, 在某温度附近取极大值, 此后随温度升高而缓慢减小; ② 原子相互作用产生的热容量 C_V 要大于磁相互作用产生的热容量 C_M , 即在对团簇的热容量的贡献中, 原子相互作用是主要的; ③ 原子相互作用产生的热容量 C_V 在温度较低时与温度成正比, 与块状磁体的 C_V 与温度的三次方成正比不同.

图 5 团簇的热容量 C_M 和 C_V 随温度的变化

5 结 论

对 Sc_nN ($n=2 \sim 12$) 团簇磁性的计算分析表明: ① 当 $n=3, 8, 9, 11, 12$ 时, 团簇的磁矩为零, 团簇的磁性消失; 当 $n=2, 4, 5, 6, 7, 10$ 时, 团簇表现为铁磁性, 其中当 $n=6$ 时, 团簇的磁性最强. ② 团簇的磁矩随 Sc 的原子数 n 波动性变化的原因在于 Sc_nN ($n=2 \sim 12$) 团簇的构型和 Sc 原子局域磁矩 M_S 矩间的相互作用

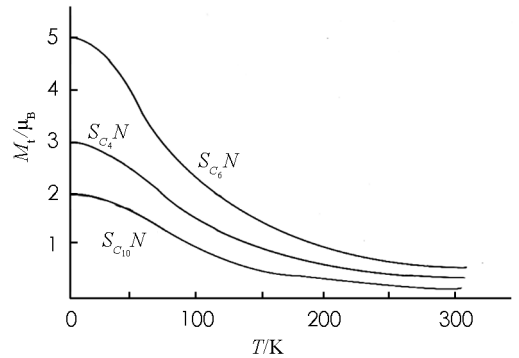


图 4 团簇的磁矩随温度的变化

均与 Sc 的原子数 n 有关. ③ Sc_nN 团簇的磁矩随温度升高而减小, 其变化趋势与块状磁体类似. ④ 温度较低时, 磁相互作用产生的热容量 C_M 随温度升高而增大, 在某温度附近取极大值, 此后随温度升高而缓慢减小; 在对团簇的热容量的贡献中, 原子相互作用占主要. ⑤ 原子相互作用产生的热容量 C_V 在温度较低时与温度成正比, 与块状磁体的 C_V 与温度的三次方成正比不同.

参考文献:

- [1] 王晓秋, 王保林, 赵纪军. Al_{12}N , Al_{12}B 团簇结构和电子性质的密度泛函计算 [J]. 原子分子物理学报, 2006, 23(6): 1151—1153.
- [2] 马文瑾, 武海顺. Al_mN^+ ($m=3\sim 9$) 团簇的结构和稳定性 [J]. 结构化学, 2003, 23(1): 73—78.
- [3] 马文瑾, 武海顺. Al_mN 和 Al_mN^+ ($m=2\sim 9$) 团簇的结构与稳定性的研究 [J]. 物理化学学报, 2004, 20(3): 1785—1793.
- [4] 李恩玲, 王雪雯, 马红, 等. Ga_nN_m^- ($n=1\sim 8$, $m=1\sim 2$) 阴离子团簇的结构及稳定性研究 [J]. 物理学报, 2006, 55(5): 2249—2256.
- [5] 马文瑾, 武海顺, 张静, 等. Ga_mN ($m=1\sim 9$) 团簇结构与稳定性的量子化学研究 [J]. 化学学报, 2007, 65(12): 1110—1116.
- [6] 赵文杰, 王清林, 任凤竹, 等. 第一性原理计算 $\text{Zr}_n\text{Fe}(n=2\sim 13)$ 团簇的几何结构及其磁性 [J]. 物理学报, 2007, 56(10): 5746—5753.
- [7] TIAN Fu-yang, WANG Yuan-xu. Structure, Stability, and Magnetism of $\text{Sc}_n\text{Al}(n=1\sim 8, 12)$ Clusters: Density-functional Theory Investigations [J]. Phys Rev A, 2008, 77: 013202—013208.
- [8] 程正富, 龙晓霞, 代武春. $\text{Sc}_n\text{N}(n=2\sim 12)$ 团簇的结构与稳定性研究 [J]. 西南师范大学学报: 自然科学版, 2010, 35: 28.
- [9] 万纤民. 固体中原子相互作用势能函数与砷金属、砷土金属弹性的电子理论 [J]. 中国科学, 1987, 27(1): 170—127.
- [10] 徐万东, 张瑞林, 于瑞璞. 固体中的单电子轨道理论 [J]. 中国科学(A辑), 1988, 28(1): 323—326.
- [11] Kittel C. Introduction to Solid Physics [M]. 2nd ed. New York: John Wiley Sons Inc, 1956: 125.

Investigation of the Magnetic Properties and Heat Capacity of $\text{Sc}_n\text{N}(n=2-12)$ Clusters

LONG Xiao-xia

School of Electron & Electrical Engineering, Chongqing University of Arts and Sciences, Yongchuan, Chongqing 402160, China

Abstract: Based on the first principle, the total magnetic moment of Sc_nN cluster ($n=2-12$) pM_t , the local magnet M_{Sc} of Sc atoms which are the closest neighbor of N atoms and the local magnetic moment MN of Sc atoms doped with N atoms are investigated, using generalized gradient approximation (GGA) under the density functional theory framework. The magnetic moment and heat capacity of ScN cluster are studied and their variations with temperature are discussed, applying the statistical physics and based on the atomic interaction. The magnetic moment of ScN cluster is found to be related to the geometry configuration, atomic interaction and magnetic interaction between magnetic particles and the number of Sc atoms (n) in the cluster. The total magnetic moment of the Sc_nN cluster fluctuates with the number of Sc atoms. The total magnetic moment is zero for $n=3, 8, 9, 11$ or 12 , and the cluster is ferromagnetic for $n=2, 4, 5, 6, 7$ or 10 , and the magnetism of cluster Sc_6N is the strongest with $n=6$. The magnetic moment of the Sc_nN cluster increases with decreasing temperature, showing a similar trend to that of the blocky magnet, i. e. the heat capacity (C_M) produced by magnetic interaction increases with rising temperature at a relatively low temperature, and the maximum value occurs when the temperature rises to a certain point. The heat capacity (C_V) produced by atomic interaction is proportional to the temperature at a relatively low temperature, which is different from the proportional relationship of C_V to the cubic power of temperature of the blocky magnet. Atomic interaction contributes most to the heat capacity of the cluster.

Key words: Sc_nN cluster; magnetic moment; heat capacity; atomic interaction; temperature