

Supplementary Material

The formation mechanism of Sc-based metallofullerenes: A molecular dynamics simulation study

Huichen Fan¹, Zhenyu Liu¹, Li-Hua Gan^{1*} and Chun-Ru Wang²

¹School of Chemistry and Chemical Engineering, Southwest University, Chongqing 400715 China

²Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190 China

E-mail: ganlh@swu.edu.cn

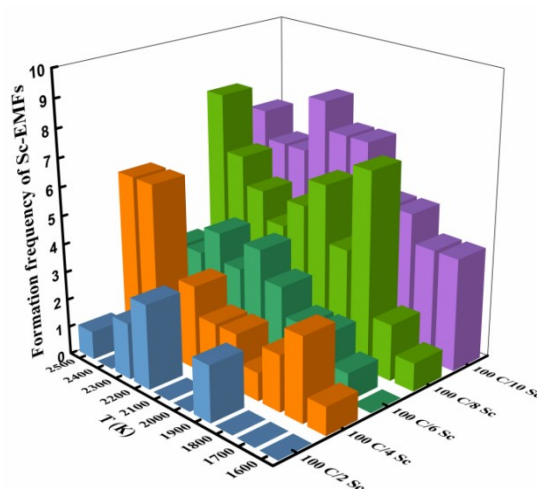


Fig. S1 Frequency forming Sc-EMFs in each system at various temperatures within 500 ps.

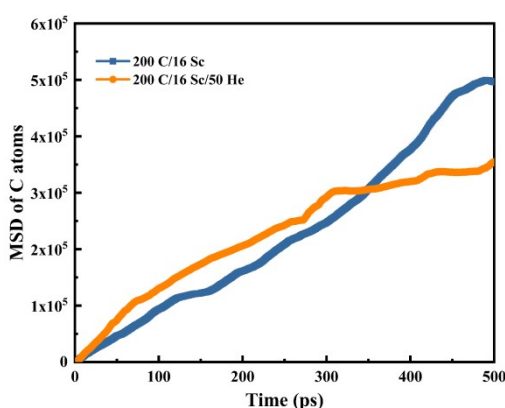


Fig. S2 The MSD of carbon atoms within 500 ps.

Table S1 The key geometrical parameters of Sc₂C₂@C₈₄ from DFT/6-31G and CSc.ff

Bond(Å)	DFT/6-31G	CSc.ff	Angle(°)	DFT/6-31G	CSc.ff
C ₁ -C ₂	1.446	1.455	C ₂ -C ₁ -C ₃	118.5	118.4
C ₁ -C ₃	1.458	1.454	C ₂ -C ₁ -C ₄	118.6	118.4
C ₁ -C ₄	1.457	1.454	C ₁ -C ₂ -C ₅	118.6	118.4
C ₂ -C ₅	1.457	1.454	C ₁ -C ₂ -C ₆	118.5	118.4
C ₂ -C ₆	1.458	1.454	C ₁ -C ₃ -C ₇	123.4	122.9
C ₃ -C ₇	1.451	1.448	C ₂ -C ₅ -C ₈	123.4	122.9
C ₅ -C ₈	1.452	1.448	C ₁ -C ₄ -C ₉	123.4	122.9
C ₄ -C ₉	1.452	1.448	C ₂ -C ₆ -C ₁₀	123.4	122.9
C ₆ -C ₁₀	1.451	1.448	C ₁ -C ₃ -C ₁₁	108.3	107.9
C ₃ -C ₁₁	1.451	1.453	C ₃ -C ₁₁ -C ₁₂	108.2	108.1
C ₁₁ -C ₁₂	1.433	1.446	C ₂ -C ₅ -C ₁₃	108.3	107.9
C ₅ -C ₁₃	1.450	1.453	C ₅ -C ₁₃ -C ₁₄	108.2	108.1
C ₁₃ -C ₁₄	1.433	1.453	C ₃ -C ₇ -C ₁₅	116.2	115.1
C ₇ -C ₁₅	1.411	1.443	C ₅ -C ₈ -C ₁₆	116.1	115.2
C ₈ -C ₁₆	1.411	1.443	C ₄ -C ₉ -C ₁₇	116.1	115.2
C ₉ -C ₁₇	1.411	1.444	C ₆ -C ₁₀ -C ₁₈	116.2	115.1
C ₁₀ -C ₁₈	1.411	1.443	C ₃ -C ₁₁ -C ₁₉	123.4	124.2
C ₁₁ -C ₁₉	1.430	1.441	C ₁₁ -C ₁₂ -C ₂₀	121.9	120.9
C ₁₂ -C ₂₀	1.430	1.441	C ₅ -C ₁₃ -C ₂₁	123.4	124.2
C ₁₃ -C ₂₁	1.430	1.441	C ₁₃ -C ₁₄ -C ₂₂	121.9	120.9
C ₁₄ -C ₂₂	1.430	1.441	C ₁₁ -C ₁₉ -C ₂₃	115.5	113.8
C ₁₉ -C ₂₃	1.420	1.441	C ₁₃ -C ₂₁ -C ₂₄	115.5	113.8
C ₂₁ -C ₂₄	1.419	1.441	C ₁₂ -C ₂₀ -C ₂₅	115.5	113.9
C ₂₀ -C ₂₅	1.419	1.441	C ₁₄ -C ₂₂ -C ₂₆	115.5	113.8
C ₂₂ -C ₂₆	1.420	1.441	C ₇ -C ₁₅ -C ₂₇	120.4	120.0
C ₁₅ -C ₂₇	1.447	1.430	C ₁₅ -C ₂₇ -C ₂₈	120.5	120.7

C ₂₇ -C ₂₈	1.385	1.407	C ₉ -C ₁₇ -C ₂₉	120.4	120.0
C ₁₇ -C ₂₉	1.447	1.430	C ₁₇ -C ₂₉ -C ₃₀	120.5	120.7
C ₂₉ -C ₃₀	1.385	1.406	C ₁₁ -C ₁₉ -C ₃₁	118.1	118.2
C ₁₉ -C ₃₁	1.469	1.443	C ₁₂ -C ₂₀ -C ₃₂	118.1	118.2
C ₂₀ -C ₃₂	1.469	1.443	C ₁₃ -C ₂₁ -C ₃₃	118.1	118.2
C ₂₁ -C ₃₃	1.469	1.443	C ₁₄ -C ₂₂ -C ₃₄	118.1	118.2
C ₂₂ -C ₃₄	1.469	1.443	C ₁₉ -C ₂₃ -C ₃₅	120.3	119.8
C ₂₃ -C ₃₅	1.436	1.424	C ₂₁ -C ₂₄ -C ₃₆	120.4	119.9
C ₂₄ -C ₃₆	1.436	1.424	C ₂₀ -C ₂₅ -C ₃₇	120.4	119.9
C ₂₅ -C ₃₇	1.436	1.424	C ₂₂ -C ₂₆ -C ₃₈	120.3	119.8
C ₂₆ -C ₃₈	1.436	1.424	C ₁₅ -C ₂₇ -C ₃₉	109.1	109.0
C ₂₇ -C ₃₉	1.439	1.431	C ₂₇ -C ₂₈ -C ₄₀	119.9	119.6
C ₂₈ -C ₄₀	1.439	1.431	C ₁₇ -C ₂₉ -C ₄₁	109.1	109.0
C ₂₉ -C ₄₁	1.439	1.431	C ₂₉ -C ₃₀ -C ₄₂	119.9	119.7
C ₃₀ -C ₄₂	1.439	1.431	C ₁₉ -C ₃₁ -C ₄₃	116.6	115.5
C ₃₁ -C ₄₃	1.422	1.443	C ₂₀ -C ₃₂ -C ₄₄	116.6	115.5
C ₃₂ -C ₄₄	1.422	1.444	C ₂₁ -C ₃₃ -C ₄₅	116.6	115.5
C ₃₃ -C ₄₅	1.422	1.444	C ₂₂ -C ₃₄ -C ₄₆	116.6	115.5
C ₃₄ -C ₄₆	1.422	1.443	C ₂₃ -C ₃₅ -C ₄₇	119.7	119.4
C ₃₅ -C ₄₇	1.384	1.403	C ₂₅ -C ₃₇ -C ₄₈	119.7	119.4
C ₃₆ -C ₄₈	1.384	1.403	C ₂₄ -C ₃₆ -C ₄₉	119.7	119.3
C ₃₇ -C ₄₉	1.384	1.403	C ₂₆ -C ₃₈ -C ₅₀	119.7	119.4
C ₃₈ -C ₅₀	1.384	1.403	C ₂₇ -C ₃₉ -C ₅₁	121.6	121.5
C ₃₉ -C ₅₁	1.422	1.443	C ₂₈ -C ₄₀ -C ₅₂	121.6	121.5
C ₄₀ -C ₅₂	1.422	1.443	C ₂₉ -C ₄₁ -C ₅₃	121.6	121.5
C ₄₁ -C ₅₃	1.422	1.443	C ₃₀ -C ₄₂ -C ₅₄	121.6	121.5
C ₄₂ -C ₅₄	1.422	1.443	C ₃₁ -C ₄₃ -C ₅₅	121.8	121.6
C ₄₃ -C ₅₅	1.440	1.431	C ₄₃ -C ₅₅ -C ₅₆	119.8	119.6
C ₅₅ -C ₅₆	1.384	1.406	C ₃₃ -C ₄₅ -C ₅₇	121.7	121.6

C ₄₅ -C ₅₇	1.440	1.431	C ₄₅ -C ₅₇ -C ₅₈	119.8	119.6
C ₅₇ -C ₅₈	1.384	1.406	C ₃₅ -C ₄₇ -C ₅₉	119.7	119.4
C ₄₇ -C ₅₉	1.435	1.423	C ₃₇ -C ₄₈ -C ₆₀	119.7	119.4
C ₄₈ -C ₆₀	1.435	1.423	C ₃₆ -C ₄₉ -C ₆₁	119.7	119.4
C ₄₉ -C ₆₁	1.435	1.423	C ₃₈ -C ₅₀ -C ₆₂	119.7	119.4
C ₅₀ -C ₆₂	1.435	1.423	C ₄₇ -C ₅₉ -C ₆₃	120.4	119.9
C ₅₉ -C ₆₃	1.418	1.439	C ₄₉ -C ₆₁ -C ₆₄	120.4	119.9
C ₆₁ -C ₆₄	1.418	1.439	C ₄₈ -C ₆₀ -C ₆₅	120.4	119.9
C ₆₀ -C ₆₅	1.418	1.439	C ₅₀ -C ₆₂ -C ₆₆	120.4	119.9
C ₆₂ -C ₆₆	1.418	1.440	C ₄₃ -C ₅₅ -C ₆₇	109.3	109.0
C ₅₅ -C ₆₇	1.446	1.431	C ₅₅ -C ₅₆ -C ₆₈	120.4	120.6
C ₅₆ -C ₆₈	1.447	1.431	C ₄₅ -C ₅₇ -C ₆₉	109.3	109.0
C ₅₇ -C ₆₉	1.447	1.431	C ₅₇ -C ₅₈ -C ₇₀	120.4	120.6
C ₅₈ -C ₇₀	1.446	1.431	C ₅₉ -C ₆₃ -C ₇₁	115.8	114.0
C ₆₃ -C ₇₁	1.431	1.440	C ₆₃ -C ₇₁ -C ₇₂	121.9	120.8
C ₇₁ -C ₇₂	1.428	1.446	C ₆₀ -C ₆₅ -C ₇₃	115.7	114.0
C ₆₅ -C ₇₃	1.431	1.440	C ₆₅ -C ₇₃ -C ₇₄	122.0	120.9
C ₇₃ -C ₇₄	1.428	1.446	C ₅₅ -C ₆₇ -C ₇₅	120.6	120.2
C ₆₇ -C ₇₅	1.411	1.444	C ₅₆ -C ₆₈ -C ₇₆	120.5	120.2
C ₆₈ -C ₇₆	1.411	1.444	C ₅₇ -C ₆₉ -C ₇₇	120.5	120.2
C ₆₉ -C ₇₇	1.411	1.44	C ₅₈ -C ₇₀ -C ₇₈	120.6	120.1
C ₇₀ -C ₇₈	1.411	1.44	C ₆₃ -C ₇₁ -C ₇₉	123.4	124.3
C ₇₁ -C ₇₉	1.453	1.453	C ₆₉ -C ₇₇ -C ₈₀	116.3	115.3
C ₇₇ -C ₈₀	1.453	1.449	C ₆₈ -C ₇₆ -C ₈₁	116.3	115.3
C ₇₆ -C ₈₁	1.453	1.449	C ₇₃ -C ₇₄ -C ₈₂	108.2	108.2
C ₇₄ -C ₈₂	1.453	1.453	C ₇₁ -C ₇₉ -C ₈₃	108.3	107.9
C ₇₉ -C ₈₃	1.455	1.455	C ₇₉ -C ₈₃ -C ₈₄	118.3	118.3
C ₈₃ -C ₈₄	1.452	1.454	C ₂ -C ₁ -Sc ₈₅	71.3	71.1
C ₁ -Sc ₈₅	2.257	2.251	C ₇₉ -C ₈₃ -Sc ₈₆	79.0	79.7

$C_{83}-Sc_{86}$	2.260	2.251	$C_1-Sc_{85}-C_{87}$	145.1	145.6
$Sc_{85}-C_{87}$	2.301	2.293	$Sc_{85}-C_{87}-C_{88}$	73.8	74.4
$C_{87}-C_{88}$	1.282	1.234			

39 ! Number of general parameters
50.0000 !p_boc1 Eq(4c): Overcoordination parameter
9.5469 !p_boc2 Eq(4d): Overcoordination parameter
26.5405 !p_coa2 Eq(15): Valency angle conjugation
1.7224 !p_trip4 Eq(20): Triple bond stabilisation
6.8702 !p_trip3 Eq(20): Triple bond stabilisation
60.4850 !k_c2 Eq(19): C2-correction
1.0588 !p_ovun6 Eq(12): Undercoordination
4.6000 !p_trip2 Eq(20): Triple bond stabilisation
12.1176 !p_ovun7 Eq(12): Undercoordination
13.3056 !p_ovun8 Eq(12): Undercoordination
-70.5044 !p_trip1 Eq(20): Triple bond stabilization
0.0000 !Lower Taper-radius (must be 0)
10.0000 !R_cut Eq(21): Upper Taper-radius
2.8793 !p_fe1 Eq(6a): Fe dimer correction
33.8667 !p_val6 Eq(13c): Valency undercoordination
6.0891 !p_lp1 Eq(8): Lone pair param
1.0563 !p_val9 Eq(13f): Valency angle exponent
2.0384 !p_val10 Eq(13g): Valency angle parameter
6.1431 !p_fe2 Eq(6a): Fe dimer correction
6.9290 !p_pen2 Eq(14a): Double bond/angle param
0.3989 !p_pen3 Eq(14a): Double bond/angle param
3.9954 !p_pen4 Eq(14a): Double bond/angle param
-2.4837 !p_fe3 Eq(6a): Fe dimer correction
5.7796 !p_tor2 Eq(16b): Torsion/BO parameter
10.0000 !p_tor3 Eq(16c): Torsion overcoordination
1.9487 !p_tor4 Eq(16c): Torsion overcoordination
-1.2327 !p_elho Eq(26a): electron-hole interaction
2.1645 !p_cot2 Eq(17b): Conjugation if tors13=0
1.5591 !p_vdW1 Eq(23b): vdWaals shielding
0.1000 !Cutoff for bond order (*100)
2.1365 !p_coa4 Eq(15): Valency angle conjugation
0.6991 !p_ovun4 Eq(11b): Over/Undercoordination
50.0000 !p_ovun3 Eq(11b): Over/Undercoordination
1.8512 !p_val8 Eq(13d): Valency/lone pair param
0.5000 !X_soft Eq(25): ACKS2 softness for X_ij
20.0000 !d Eq(23d): Scale factor in lg-dispersion
5.0000 !p_val Eq(27): Gauss exponent for electrons
0.0000 !1 Eq(13e): disable undecoord in val angle
2.6962 !p_coa3 Eq(15): Valency angle conjugation

4 ! Nr of atoms; cov.r; valency;a.m;Rvdw;Evdw;gammaEEM;cov.r2;#
 alfa;gammavdW;valency;Eunder;Eover;chiEEM;etaEEM;n.u.
 cov r3;Elp;Heat inc.;bo131;bo132;bo133;softcut;n.u.

```

ov/un;vall;n.u.;val3,vval4
C  1.3674  4.0000 12.0000  2.0453  0.1444  0.8458  1.1706  4.0000
   9.0000  1.5000  4.0000 29.4878 79.5548  5.4674  6.0000  0.0000
   1.1668  0.0000 181.0000 14.2732 24.4406  6.7313  0.8558  0.0000
  -3.9334  5.0008  1.0564  4.0000  2.9663  0.0500  0.0000  0.0000
H   0.8930  1.0000  1.0080  1.3550  0.0930  0.8203 -0.1000  1.0000
   8.2230 33.2894  1.0000  0.0000 121.1250  3.7248  9.6093  1.0000
  -0.1000  0.0000 55.1878  3.0408  2.4197  0.0003  1.0698  0.0000
 -19.4571  4.2733  1.0338  1.0000  2.8793  0.0000  0.0000  0.0000
Sc  0.0902  3.0000 44.9559  0.9956  0.1498  0.0050 -0.0500  3.0000
  10.9962  1.0000  3.0000 13.8863 86.7409  5.4999  9.2045  0.0000
  -1.0000  0.0000 91.7672  0.0068  0.0051  5.2540  1.1007  0.0000
   0.0000  2.0733  1.0094  1.6000  2.9861  0.0000  0.0000  0.0000
He -0.1000  2.0000  4.0026  1.3000  0.0050  0.5000 -0.1000  4.0000
  12.0000  4.0000  4.0000  0.0000  0.0000  5.0000 13.0000  0.0000
  -0.1000  0.0000 -2.3700  6.4918  8.5961  0.2368 10.8563  0.0000
  -5.0000  3.1873  1.0338  6.2998  2.5791  2.0000  3.0000 11.5000
6   ! Nr of bonds; Edis1;LPpen;n.u.;pbe1;pbo5;l3corr;pbo6
      pbe2;pbo3;pbo4;n.u.;pbo1;pbo2;ovcorr
1  1  88.8853 107.9956 52.0729  0.5218 -0.3647  1.0000 34.9982  0.7768
   6.1249 -0.1693  8.0821  1.0000 -0.0586  8.1832  1.0000  0.0000
1  2 169.4760  0.0000  0.0000 -0.6083  0.0000  1.0000  6.0000  0.7652
   5.2290  1.0000  0.0000  1.0000 -0.0553  6.9316  0.0000  0.0000
2  2 153.3934  0.0000  0.0000 -0.4600  0.0000  1.0000  6.0000  0.7300
   6.2500  1.0000  0.0000  1.0000 -0.0790  6.0552  0.0000  0.0000
1  3  78.0000  0.0000  0.0000  0.2500 -0.5000  1.0000 45.0000  0.6000
   0.4000 -0.2500 15.0000  1.0000 -0.1000 10.0000  1.0000  0.0000
2  3  0.0000  0.0000  0.0000 -0.1577  0.0000  1.0000  6.0000  0.5000
   17.8821  1.0000  0.0000  1.0000 -0.2095  6.3931  0.0000  0.0000
3  3 56.8290  0.0000  0.0000  0.6031 -0.2000  0.0000 16.0000  0.4442
   0.4759 -0.2000 15.0000  1.0000 -0.1789  8.7946  0.0000  0.0000
2   ! Nr of off-diagonal terms; Ediss;Ro;gamma;rsigma;rpi;rpi2
1  2  0.1239  1.4004  9.8467  1.1210 -1.0000 -1.0000
1  3  0.0840  1.6500 10.5600  1.2900 -1.0000 -1.0000
6   ! Nr of angles;at1;at2;at3;Thetao,o;ka;kb;pv1;pv2
1  1  1  68.1748 30.9669  0.9699  0.0000  0.0082  0.3589  2.5747
1  1  2  65.7758 14.5234  6.2481  0.0000  0.5665  0.0000  1.6255
2  1  2  70.2607 25.2202  3.7312  0.0000  0.0050  0.0000  2.7500
1  2  2  0.0000  0.0000  6.0000  0.0000  0.0000  0.0000  1.0400
1  2  1  0.0000  3.4110  7.7350  0.0000  0.0000  0.0000  1.0400
2  2  2  0.0000 27.9213  5.8635  0.0000  0.0000  0.0000  1.0400
6   ! Nr of torsions;at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;V2(BO);vconj;n.u;n
1  1  1  1  2.1207 26.8713  0.5160 -9.0000 -2.8394  0.0000  0.0000
1  1  1  2 -0.2500 29.2131  0.2945 -4.9581 -2.1802  0.0000  0.0000

```

2	1	1	2	-0.2500	31.2081	0.4539	-4.8923	-2.2677	0.0000	0.0000
0	1	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	50.0000	0.3000	-4.0000	-2.0000	0.0000	0.0000

0 ! Nr of hydrogen bonds;at1;at2;at3;Rhb;Dehb;vhb1