

## 研究论文

### Fe/Cr超晶格的电子结构和磁性质

胡海泉; 李恒帅; 崔守鑫; 王文军

聊城大学物理科学与信息工程学院, 山东 聊城 252059

#### 摘要:

应用密度泛函全势线性缀加平面波(FLAPW)方法研究了Fem/Crn ( $m=3, 4; n=1, 3, 4$ )超晶格的电子结构和磁性质. 结果表明, Fe<sub>3</sub>/Cr<sub>1</sub>和Fe<sub>3</sub>/Cr<sub>3</sub>体系的基态中, Fe层间存在铁磁耦合; 而Fe<sub>4</sub>/Cr<sub>4</sub>体系基态中, 存在反铁磁耦合; Cr层的磁矩方向交替变化, 交界面上的Fe和Cr间存在反铁磁耦合.

关键词: 电子结构 磁性质 密度泛函理论

收稿日期 2006-11-29 修回日期 2007-01-27 网络版发布日期 2007-04-27

通讯作者: 胡海泉 Email: huhq@lcu.edu.cn

#### 本刊中的类似文章

1. 崔明侠;董士红;王文亮;尹世伟;吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(*N,N*-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 347-352
2. 史鸿运,王一波,邓洁,张云黔,张涛. 沙蚕毒系化合物的结构与生物活性关系[J]. 物理化学学报, 1995,11(12): 1089-1092
3. 曹泽星,黄宏新,田安民.  $O_3^-$  激发态电子结构及内部电荷转移理论研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 97-101
4. 陈学安,赵凌,李言,陈本明,傅亨.  $C_{2v}$  近邻环境对金属碳化物电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 245-251
5. 胡云玩;钱惠琴;陈桥;毛宏颖;宋飞;黄寒;李海洋;何丕模;鲍世宁. Fluorescein有机薄膜在Ag(110)面上的生长研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 470-474
6. 崔万秋;雷鸣.  $TiC$ 、 $TiC_{1-x}$ 、 $(Ti_{1-x}Nb_x)C$ 电子结构的计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 198-203
7. 赵良仲;刘芬;张琳.  $LnCu_2O_4$  ( $Ln=Gd, Nd$ )电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 310-313
8. 武晓君;李群祥;黄静;杨金龙. 单分子器件电子输运性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 995-1002
9. 殷元骐, 李文, 汪汉卿. 簇合物 $Co_6(\mu_3-E)_8(CO)_6$  ( $E:-S, -Se$ )的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 151-156
10. 杨胜勇;肖慎修;陈天朗.  $(NiV_{13}O_{38})^{7-}$ 的电子结构和催化性质的探讨[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1071-1074
11. 周传华;李奇;黄元河;刘若庄. 聚噻吩取代效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 825-829
12. 李荣;周上祺;陈昌国;梁国明;刘守平;孔纪兰. 钒氢化物电子结构的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 716-720
13. 黄寒;严欣激;毛宏颖;陈桥;钱惠琴;张建华;李海洋;何丕模;鲍世宁. 银(110)表面花有序薄膜电子态的研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 892-896
14. 罗文华;蒙大桥;李赣;陈虎翅.  $Pu_3M$ 和 $PuM_3$  ( $M=Ga, In, Sn, Ge$ )化合物的电子结构和形成热[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 388-392
15. 苗月;袁宏宽;陈洪. 双钙钛矿 $Sr_{2-x}La_xCrReO_6$ 的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
16. 梁初;黎光旭;蓝志强;刘奕新;韦文楼;郭进.  $LiAlH_4$ 与 $Li_3AlH_6$ 的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 686-690
17. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵.  $CdO$ 及 $Cd_xZn_{1-x}O$ 化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1233-1238
18. 罗世霞;张笑一;张思亭;朱淮武;胡继伟;卫钢. 巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1471-1476

扩展功能

本文信息

PDF(236KB)

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

▶ 电子结构

▶ 磁性质

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 胡海泉

▶ 李恒帅

▶ 崔守鑫

▶ 王文军

19. 张华;陈小花;张振华;邱明.接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J].物理化学学报,2006,22(09): 1101-1105
20. 吕海港;黎乐民.表观价态异常分子EuS<sub>2</sub>和Eu<sub>2</sub>S的泛函理论研究[J].物理化学学报,1998,14(05): 413-418
21. 胡亚兰;黄锋;蒋辉;范崇旭;陈常英;陈冀胜.α-芋螺毒素构效关系与分子设计[J].物理化学学报,2005,21(05): 474-478
22. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢.间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J].物理化学学报,2004,20(12): 1476-1480
23. 陈琦丽 唐超群.N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO<sub>2</sub>(101)表面电子结构的第一性原理计算[J].物理化学学报,2009,25(05): 915-920
24. 张材荣;吴有智;陈玉红;陈宏善.有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质[J].物理化学学报,2009,25(01): 53-60
25. 李葵英;郭静;刘通;周冰晶;李悦.掺镧多孔TiO<sub>2</sub>纳米晶表面电子结构与能量转换机制[J].物理化学学报,2008,24(11): 2096-2101
26. 李来才;王译伟;田安民.甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附[J].物理化学学报,2008,24(11): 2013-2018
27. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎.有机-无机杂化化合物[Cu(μ-cbdca)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>的电子结构及铁磁性[J].物理化学学报,2008,24(09): 1681-1684
28. 张丽敏;范广涵;丁少锋.Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J].物理化学学报,2007,23(10): 1498-1502
29. 欧阳方平;徐慧;李明君;肖金.Armchair型石墨纳米带的电子结构和输运性质[J].物理化学学报,2008,24(02): 328-332
30. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属烃配合物M<sub>n</sub>H<sub>n</sub>C密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2007,23(05): 743-745
31. 张建华;庄友谊;吴悦;鲍世宁;刘凤琴;奎热西·易卜拉欣;钱海杰.己烯在Ru(1010)表面价带电子特性研究[J].物理化学学报,2002,18(05): 437-440
32. 杨刚;龙翔云;杨高文;曾小君.二苯并四氮杂[14]轮烯金属配合物电子结构和性质 [J].物理化学学报,2002,18(02): 100-105
33. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤.HBO<sub>2</sub>异构体的结构和相对稳定性[J].物理化学学报,2002,18(01): 87-90
34. 施申蕾;楼辉;张建华;吕萍;江宁;何丕模;鲍世宁.COT-H在金属Ru表面上沉积的光电子能谱分析[J].物理化学学报,2002,18(01): 30-33
35. 吴卫东;张占文;罗江山;唐永建;郑永铭;陆晓明;赵鹏骥.Cu<sub>x</sub>C<sub>60</sub>薄膜紫外-可见吸收光谱研究[J].物理化学学报,2001,17(01): 83-86
36. 陈常英;丁晓琴;冯珊.西加毒素(CTX)的电子结构及构效关系研究[J].物理化学学报,2000,16(04): 307-311
37. 徐国亮.原子个数n对碳分子线C<sub>n</sub>(n=3~10)基态结构特性的影响[J].物理化学学报,2006,22(06): 701-705
38. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦.草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J].物理化学学报,1999,15(03): 204-209
39. 李文;张瑞林;余瑞璜.Ti-Al系金属间化合物的价电子结构分析[J].物理化学学报,1999,15(09): 824-829
40. 张琳;赵良仲;张金彪;徐翠英;刘世宏.BaKPtO和BaKPbBiO的熔盐阳极电结晶[J].物理化学学报,1999,15(11): 1049-1052
41. 邱丽美;刘芬;赵良仲.K-Pb-Tl-O复合氧化物的合成和电子结构的XPS研究 [J].物理化学学报,2002,18(07): 633-635
42. 董南;朱龙观;吴念慈.La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·bipy·2H<sub>2</sub>O·(B-15-C-5)电子结构和电化学键[J].物理化学学报,1993,9(02): 252-255
43. 黎乐民.[Nd(SSCNH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>的电子结构 一种有机硫配位镧系络合物的模型阴离子[J].物理化学学报,1992,8(01): 10-17
44. 李丽;吴锋;陈实;陈人杰 .LaNi<sub>5-x</sub>Cox合金电子结构的第一性原理分析[J].物理化学学报,2006,22(11): 1331-1336
45. 倪敏;贺黎明;金乾元;刘洪霖.非晶态Co-B的局域电子结构的X<sub>0</sub>原子簇计算[J].物理化学学报,1992,8(04): 550-554
46. 刘光华;黎乐民;徐光宪;梁珍璇.五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J].物理化学学报,1991,7(01): 64-71
47. 叶元杰.蛋白质的电子结构与活性关系——理论与计算方法[J].物理化学学报,1991,7(03): 257-259
48. 陈学安;傅亨;唐有祺;朱敏慧;徐江.结构调制对Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CuO<sub>6</sub>电子结构的影响[J].物理化学学报,1991,7(04): 396-399
49. 贾建峰;武海顺.BN纳米管内含C纳米管——结构与电学性质[J].物理化学学报,2006,22(12): 1520-1525

50. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂 $K_4Ce_2Ta_{10}O_{30}$ 、 $K_4Ce_2Nb_{10}O_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007, 23(04): 466-472
51. 张子英, 杨德林, 刘云虎, 曹海滨, 邵建新, 井群.  $BaTiO_3$ 的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(09): 1731-1736
52. 负江妮, 张志勇. In、Sc掺杂对 $SrTiO_3$ 电子结构和光学性质的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
53. 曹青松, 邓开明.  $C_{56}X_{10}$ (X=F, Cl, Br, I)的结构稳定性和电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
-