

量子化学及计算化学

三角晶格反铁磁CuFeO<sub>2</sub>的磁性和电子结构

仲崇贵, 蒋青, 董正超, 方靖淮, 曹海霞

苏州大学物理科学与技术学院, 江苏 苏州 215006; 南通大学理学院, 江苏 南通 226007

摘要:

基于广义梯度近似(GGA)的密度泛函理论(DFT), 通过构造铁磁(FM), 阻挫的三角非共线反铁磁(FAFM)、上上下下型共线反铁磁( $\uparrow\downarrow\downarrow$ AFM)三种不同磁性构型, 从非共线磁性结构计算出发, 优化了低温铜铁矿CuFeO<sub>2</sub>晶体材料的几何结构, 研究了磁性结构对电子结构、能隙和磁矩等的作用. 计算发现上上下下型反铁磁自旋排列能促进能隙形成, 总能降低, 磁矩增大. 由于上上下下型反铁磁与阻挫三角非共线反铁磁相能量接近, 外场的作用容易导致磁性结构变到阻挫的三角反铁磁态, 其电子态密度分布与X光发射光谱测得的结果一致, 即具有高自旋的Fe离子3d电子自旋向上的子带中心位于Cu 3d能态之下, O 2p能态以上, 而且配位场理论分析表明Fe离子3d态自旋向下的空轨道为铁电极化提供了有利的化学环境.

关键词: 铁磁 反铁磁 阻挫 磁电 杂化 配位场

收稿日期 2009-10-13 修回日期 2009-12-20 网络版发布日期 2010-01-07

通讯作者: 蒋青 Email: qjiang@suda.edu.cn; chgzhong@ntu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 迟广俊;冯钊永;赵瑾;姚素薇. 纳米金属多层膜与多层纳米线的电化学制备及其表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 177-180
2. 李亚栋;章建辉;朱长飞;刘卫;熊曹水;周移;钱逸泰. La<sub>0.67</sub>Sr<sub>0.33</sub>Fe<sub>x</sub>Mn<sub>1-x</sub>O<sub>3</sub> 制备和奇特磁电阻效应[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1079-1083
3. 蒋葵阳;张隽;桂琳琳. PMMA-ZrO<sub>2</sub>等有机无机杂化材料的制备与表征[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 407-412
4. 姚素薇;吴海霞;王宏智;张卫国. 半导体Si上电沉积Cu-Co颗粒膜及其巨磁电阻效应[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 915-919
5. 董相廷;何颖;闫景辉;薛勃飞;冯秀丽;洪广言. 纳米AgBr/PMMA光致变色杂化材料制备与表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1159-1162
6. 聂春发;索继栓. 杂化MCM-41固载催化剂的合成、表征及催化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 149-153
7. 姚素薇;赵瑾;王宏智;董大为. 超晶格多层膜的电化学制备、表征及其GMR特性的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 892-895
8. 张宏晔;嵇天浩;李玲龙;齐兴义;刘奕帆;蔡建旺;杜海燕;孙家跃. 室温铁磁性Ni<sup>2+</sup>掺杂TiO<sub>2</sub>纳米带的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 607-611
9. 吕瑾;许小红;武海顺. (CoCr)<sub>n</sub> (n=1-5)合金团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1252-1256
10. 贾瑞杰;王培;郭睿倩;韦玮;韩建涛;彭波;黄维. 碲化镉/马来酰亚胺三嗪纳米杂化材料的制备及其光性能研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1143-1146
11. 缪明明;孙献茹;石敬民;程鹏;廖代正;姜宗慧;王耕霖. 四碘代对苯二甲酸根桥联的双钴(II)配合物的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(07): 577-580
12. 张隽;罗胜成;桂琳琳;唐有祺. PMMA-TiO<sub>2</sub>有机无机杂化玻璃的制备与表征[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 289-292
13. 沈新春 王文清 龚葵 张炎.  $\alpha$ -甘氨酸晶体的动态磁手性和磁电效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2153-2158
14. 倪杰;黎安勇;闫秀花. HNO与(HF)<sub>1≤n≤3</sub>分子间的蓝移与红移氢键[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2000-2006
15. 孙文秀;张聪杰. 一种新型包含平面四配位碳二硼有机化合物的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 32-36
16. 徐国亮;肖小红;刘玉芳;孙金锋;朱正和. 外电场作用下甲基乙烯基硅酮分子结构和电子光谱[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 746-750

扩展功能

本文信息

PDF(1262KB)

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

- ▶ 铁磁
- ▶ 反铁磁
- ▶ 阻挫
- ▶ 磁电
- ▶ 杂化
- ▶ 配位场

本文作者相关文章

- ▶ 仲崇贵
- ▶ 蒋青
- ▶ 董正超
- ▶ 方靖淮
- ▶ 曹海霞

17. 姚素薇;姜莹;张卫国.自旋阀多层膜的电化学制备及其巨磁电阻效应[J].物理化学学报,2007,23(04):493-498
18. 董相廷;张丽;张伟;王丽萍;洪广言.纳米CeO<sub>2</sub>/聚苯乙烯杂化材料的制备及表征[J].物理化学学报,2001,17(08):739-742
19. 张晟卯;高永建;张治军;党鸿辛;刘维民;薛群基.仿贝壳自组装纳米复合薄膜的制备及结构表征[J].物理化学学报,2002,18(05):451-454
20. 李海洋;鲍世宁;杨东;何丕模;徐亚伯;刘凤琴;易布拉欣.奎热西;钱海杰.K/Ru(1010)表面上的CO-4a<sub>1</sub>轨道对称性确定[J].物理化学学报,2000,16(05):437-440
21. 李浩华;黎超;李伟;李成贤;葛世慧.电沉积Co-Cu颗粒膜的巨磁电阻效应[J].物理化学学报,2000,16(06):573-576
22. 王美佳;纪小会;王连英;刘敏;刘艳梅;白玉白;李铁津;李景虹.DNA在纳米金标上的组装、杂交、检测与银增强[J].物理化学学报,2003,19(09):879-882
23. 林慰楨;沙昆源.d<sup>N</sup>离子在三角场中的基矢及有关矩阵元[J].物理化学学报,1992,8(01):45-51
24. 常光洁;李隼.等性扩展基杂化轨道的构造[J].物理化学学报,1991,7(04):462-466
25. 王金娥,杨春.PW11/SBA-15介孔杂化材料的直接合成与表征[J].物理化学学报,2010,26(02):515-520