

有机双自由基体系的磁性耦合规律

仇永清,赵成大

东北师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用量子化学从头算UHF方法对系列有机双自由基体系的基态自旋耦合规律进行研究,进一步证实了自由基之间在共轭体系中出现铁磁性耦合的拓扑规则,统一了关于自由基耦合规律的几种解释,为有机磁性材料的实验合成提供了理论指导。

关键词 [耦合](#) [从头计算法](#) [磁性](#) [铁磁性](#) [共轭体系](#) [自由基](#) [拓扑规则](#) [有效交换积分](#)

分类号 [0621.16](#)

Magnetic coupling laws of organic biradicals

QIU YONGQING,ZHAO CHENGDA

Abstract Spin-coupling rules of ground state have been studied for a series of organic biradicals using quantum-chemical ab initio UHF methods. It is further proved that there are topological rules of ferromagnetic coupling between radicals in conjugated systems. Several explanations about radical coupling have been unified in order to provide theoretical guide for experimental synthesis of magnetic materials.

Key words [COUPLING](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MAGNETISM](#) [FERROMAGNETISM](#) [FREE RADICALS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(263KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“耦合”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [仇永清](#)

· [赵成大](#)