

卤代PNNO的磁性及相变温度

路慧哲,仇永清,赵成大,傅强

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GAUSSIAN 92 UHF PM3方法对卤素取代的PNNO进行研究,讨论了它的磁性及电子结构,并用自旋波理论预测了其二聚物的磁性相变温度(T_c),与用同样方法得到的对位硝基取代的PNNO相变温度比较,发现卤代PNNO有更高的相变温度。

关键词 [电子结构](#) [磁性](#) [相转变温度](#) [自旋波理论](#) [PNNO](#)

分类号 [0641](#)

Magnetism and ferromagnetic transition temperature of X-substituted PNNO

LU HUIZHE, QIU YONGQING, ZHAO CHENGDA, FU QIANG

Abstract Magnetism and ferromagnetic transition temperature (T_c) of X-substituted PNNO have been investigated by using quantum chemical GAUSSIAN 92 UHF PM3 method and spin wave theory. Study of nitro group substituted PNNO (p-NPNN) showed that X-substituted PNNO has higher T_c than p-NPNN.

Key words [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [MAGNETISM](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(251KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“电子结构”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [路慧哲](#)
- [仇永清](#)
- [赵成大](#)
- [傅强](#)