

异自旋中心三自由基分子的磁性设计

傅强,仇永清,崔岚,陈丽莉,马继承

东北师范大学化学学院功能材料化学研究所,长春(130024)

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DFT UB3LYP方法,在6-31G(d)基组水平上讨论了以1,3,5-苯为铁磁耦合单元的异自旋中心三自由基体系。结果表明:对于异自旋三自由基体系,形成异自旋后对称性降低使部分占据的近简并轨道能级劈裂值增大,反铁磁耦合作用普遍增强。由两个同自旋和一个异自旋中心构成的三自由基若保持较好的对称性( $C_{2v}$ )可望表现铁磁耦合。在通常情况下这类分子服从已有规律: $\Delta E_{(POMO)}$ 小, $\Delta E_{(D-Q)}$ 大,表现为稳定的四重态基态,且其稳定性与苯环2,4,6碳位置及自由基原子上的自旋密度相关。

**关键词** [苯](#) [游离基](#) [铁磁材料](#) [自旋](#) [轨道](#) [耦合](#)

分类号 [0641](#)

## Design of Tri-radical Ferromagnets with Heterospin Centers

Fu Qiang, Qiu Yongqing, Cui Lan, Chen Lili, Ma Jicheng

Institute of Functional Material Chemistry, Faculty of Chemistry, Northeast Normal University, Changchun(130024)

**Abstract** A series of tri-radicals with heterospin center of 1,3,5-trisubstituted benzene as ferromagnetic coupling unit has been studied by using quantum chemical DFT UB3LYP method. The result shows that part-occupied near-degenerate orbitals split value and diaferromagnetic coupling increases when symmetry of heterotri-radicals decreases. Ferromagnetic coupling can be obtained when the tri-radicals of two isospin and one heterospin center maintain the symmetry of  $C_{2v}$ . Commonly, these molecules follow the rules that small  $\Delta E_{(POMO)}$  and large  $\Delta E_{(D-Q)}$  values lead to a stable quartet ground state and the stability correlates to the 2,4,6-carbon position on benzene ring and the spin density of the radical atom.

**Key words** [BENZENE](#) [FREE RADICAL](#) [FERROMAGNETIC MATERIALS](#) [SPIN](#) [ORBITS](#) [COUPLING](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“苯”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [傅强](#)
- [仇永清](#)
- [崔岚](#)
- [陈丽莉](#)
- [马继承](#)