

引用信息: Zhang Jing-Lai; Miao Ti-Fang; Tao Ruo-Jie; Zang Shuang-Quan; Tian An-Min. Acta Phys. -Chim. Sin., 2003, 19(06): 549-552 [张敬来; 苗体方; 陶偌偈; 臧双全; 田安民. 物理化学学报, 2003, 19(06): 549-552]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 酚氧桥联铜钴异双核配合物的密度泛函研究

张敬来; 苗体方; 陶偌偈; 臧双全; 田安民

河南大学化学化工学院, 开封 475001; 四川大学化学系, 成都 610064

### 摘要:

用密度泛函方法, 在ROB3LYP/SDD//ROB3LYP/LanL2MB水平上, 对酚氧桥联Cu II-Co II异双核配合物CuCo(TS)(H<sub>2</sub>O), 进行了理论计算. 优化得到了它的单、三重态的平衡几何构型, 计算了它们的谐振动频率. 结果表明, 该配合物分子的三重态比单重态稳定; 电子自旋布居高度集中在Co(6)及其周围的配体原子上, 而Cu(1)则没有发现电子自旋布居; 体系中存在较强的自旋离域效应. 体系的前线分子轨道主要由Co(6)的d轨道和配体原子的p轨道组成, 这有利于配体原子与Co(6)之间的电子转移. 计算结果与实验符合得很好.

关键词: 异双核配合物 密度泛函 自旋布居 分子磁性

收稿日期 2002-10-21 修回日期 2003-01-15 网络版发布日期 2003-06-15

通讯作者: 张敬来 Email: zhangjinglai@henu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1486KB\)](#)

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

[▶ 异双核配合物](#)

[▶ 密度泛函](#)

[▶ 自旋布居](#)

[▶ 分子磁性](#)

本文作者相关文章

[▶ 张敬来](#)

[▶ 苗体方](#)

[▶ 陶偌偈](#)

[▶ 臧双全](#)

[▶ 田安民](#)