

端接配体原子的电负性对磁耦合作用的影响

胡海泉,陈志达,刘成卜

北京大学化学与分子工程学院,北京(100871);山东大学理论化学研究所,济南 (250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 应用微扰理论,分析了端接配体原子的电负性对体系磁耦合作用的影响。研究表明,随着端接配体原子电负性的增大,磁中心间的耦合作用减弱。应用密度泛函理论和对称性破缺方法对双核铜(II)模型体系进行了计算,计算结果验证了上述结论。

**关键词** [磁耦合](#) [电负性](#) [微扰化](#) [铜络合物](#)

分类号 [064](#)

## Effect of Electronegativity of Atoms in Terminal Ligands on Magnetic Coupling Interactions

Hu Haiquan, Chen Zhida, Liu Chengbu

State Key Laboratory of Rare Earth Materials Chemistry and Applications, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing(100871); Institute of Theoretical Chemistry, Shandong University, Jinan(250100)

**Abstract** The influence of electronegativity of atoms in terminal ligands on magnetic coupling interactions has been analyzed with perturbation theory. It is shown that the interaction among the magnetic centers is reduced with an increase in electronegativity of atoms in terminal ligands. By density functional theory and the broken symmetry approach the calculations have been performed on some binuclear Cu(II) molecules. The calculated results supported the above conclusion.

**Key words** [magnetic coupling](#) [electronegativity](#) [perturbation theory](#) [COPPER COMPLEX](#)

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“磁耦合”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [胡海泉](#)

· [陈志达](#)

· [刘成卜](#)