

引用信息: MA Jian-yi; LI Juan-qin; HE Rong-xing; FU Ke-xiang; LI Xiang-yuan. Acta Phys. -Chim. Sin., 2005, 21(08): 829-833 [马建毅; 李娟琴; 何荣幸; 傅克祥; 李象远. 物理化学学报, 2005, 21(08): 829-833]

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

电子转移溶剂重组能计算的自洽反应场新方法

马建毅; 李娟琴; 何荣幸; 傅克祥; 李象远

四川大学化工学院, 成都 610065; 四川大学物理学院, 成都 610065

摘要:

基于非平衡溶剂化理论, 推导了用于非平衡溶剂化能数值计算的类导体屏蔽模型(COSMO)的相关公式. 在此基础上, 修改了HONDO99中COSMO模块, 并用以估算了 $[(\text{CH}_2)_2\text{C}] + -(\text{CH}_2)_n-\text{C}(\text{CH}_2)_2$  ( $n=1\sim 13$ )体系中的电子转移溶剂重组能. 结果表明, 溶剂重组能值与电子转移距离的倒数有很好的线性关系. 根据溶剂重组能数值解结果, 用新的双球模型给出了合理的给受体球半径.

关键词: 非平衡溶剂化 电子转移 数值计算 溶剂重组能 双球模型

收稿日期 2004-12-20 修回日期 2005-03-07 网络版发布日期 2005-08-15

通讯作者: 李象远 Email: xyli@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 涂喆研; 李象远; 傅克祥; 何福城. 溶剂-导体界面电子转移溶剂重组能的球-界面模型[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 1-5

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(344KB)

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

▶ 非平衡溶剂化

▶ 电子转移

▶ 数值计算

▶ 溶剂重组能

▶ 双球模型

本文作者相关文章

▶ 马建毅

▶ 李娟琴

▶ 何荣幸

▶ 傅克祥

▶ 李象远