

研究论文

DFT能量分解和氮苯叉基苯胺分子 $n$ 电子离域能的研究

马艳平, 包鹏, 虞忠衡

中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京 100080

收稿日期 2005-8-17 修回日期 网络版发布日期 2007-4-3 接受日期

**摘要** 为了探索密度泛函理论(DFT)方法中氮苯叉基苯胺分子 $n$ 电子离域的本质, 介绍了将非平面分子氮苯叉基苯胺分子的DFT能量分成 $n$ 和 $\sigma$ 的方法, 并将 $n$ 和 $\sigma$ 电子能量分成单电子能部分: 动能 $\Delta E_{\text{K}}^n(\theta)$ ,  $\Delta E_{\text{K}}^{\sigma}(\theta)$ 和位能 $\Delta E_{\text{P}}^n(\theta)$ ,  $\Delta E_{\text{P}}^{\sigma}(\theta)$ ; 双电子相互作用部分: 库仑作用 $\Delta E_{\text{J}}^{nn}(\theta)$ ,  $\Delta E_{\text{J}}^{\sigma\sigma}(\theta)$ ,  $\Delta E_{\text{J}}^{n\sigma}(\theta)$ 和交换相关作用 $\Delta E_{\text{XC}}^{nn}(\theta)$ ,  $\Delta E_{\text{XC}}^{\sigma\sigma}(\theta)$ 以及 $\Delta E_{\text{XC}}^{n\sigma}(\theta)$ , 分析了垂直离域能 $\Delta E^{\text{V}}$ 的稳定性及 $n$ 电子离域对 $n$ 和 $\sigma$ 体系的影响. 在B3LYP/6-31G\*, 6-311G\*, 6-31G(2d), 6-311G(2d)水平下的计算结果表明, 与经典观点不同,  $n$ 电子的离域是失稳定的, 且平时失稳定性最强; 分析各个能量分量表明, 在 $n$ 电子的离域过程中,  $n$ 和 $\sigma$ 体系均对基组较敏感,  $n$ 体系本身单电子能的影响大于 $\sigma$ 体系,  $n$ 电子离域对双电子部分作用的影响主要体现在 $n$ - $\sigma$ 的耦合作用上.

**关键词** [密度泛函能量分解](#) [n电子离域](#) [氮苯叉基苯胺](#)

**分类号** [O641](#) [O626](#)

**DOI:**

通讯作者:

虞忠衡 [yuzh@iccas.ac.cn](mailto:yuzh@iccas.ac.cn)

作者个人主页: 马艳平; 包鹏; 虞忠衡

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(387KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“密度泛函能量分解”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [马艳平, 包鹏, 虞忠衡](#)