

概念密度泛函理论及近来的一些进展

刘述斌

Research Computing Center, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599-3420, USA

摘要:

概念密度泛函理论(又称密度泛函活性理论或化学密度泛函理论)是密度泛函理论(DFT)的化学活性理论. 本文对其理论框架和最新进展进行了概述, 包括电负性、硬度、软度、福井函数、亲电性, 及其从这些概念中得到的原理. 介绍了二元描述符和立体效应定量描述的新进展, 并对今后的发展作出了展望.

关键词: 概念密度泛函理论 电负性 硬度 软度 福井函数 亲电性 二元描述符 立体效应

收稿日期 2008-11-25 修回日期 2008-12-13 网络版发布日期 2009-01-07

通讯作者: 刘述斌 Email: shubin@email.unc.edu

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1284KB)

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

▶ 概念密度泛函理论

▶ 电负性

▶ 硬度

▶ 软度

▶ 福井函数

▶ 亲电性

▶ 二元描述符

▶ 立体效应

本文作者相关文章

▶ 刘述斌