

溶剂-导体界面电子转移溶剂重组能的球-界面模型

涂喆研; 李象远; 傅克祥; 何福城

四川大学化工学院, 成都 610065

摘要:

在连续介质理论上, 根据热力学基本原理, 用一个外加电场 E_{ex} 将非平衡态 $2[E_{non2}, D_{non2}]$ 变成约束平衡态 $[E^*2, D^*2]$, 推导出了正确普适的溶剂重组能公式. 基于球-界面近似, 推导出了正确的溶剂-导体界面电子转移溶剂重组能公式. 和Marcus的公式相比, 本文的结果多了 $(\epsilon_s - \epsilon_{op}) / (\epsilon_{op}(\epsilon_s - 1))$ 因子. 对极性溶剂, 预测的溶剂重组能约为Marcus模型所得结果的一半. 以C343(Coumarin 343)-TiO₂体系为算例, 计算了溶剂重组能并与实验值进行了比较.

关键词: 非平衡溶剂化; 约束平衡; 溶剂重组能; 界面

收稿日期 2008-07-17 修回日期 2008-09-16 网络版发布日期 2008-11-03

通讯作者: 李象远 Email: xyli@scu.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(175KB)

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; 约束平衡; 溶剂重组能; 界面

本文作者相关文章

▶ 涂喆研

▶ 李象远

▶ 傅克祥

▶ 何福城