

引用信息: XU Guo-Liang; XIAO Xiao-Hong; LIU Yu-Fang; SUN Jin-Feng; ZHU Zheng-He. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(05): 746-750 [徐国亮;肖小红;刘玉芳;孙金锋;朱正和. 物理化学学报, 2007, 23(05): 746-750]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究简报

外电场作用下甲基乙烯基硅酮分子结构和电子光谱

徐国亮;肖小红;刘玉芳;孙金锋;朱正和

河南师范大学物理与信息工程学院, 河南 新乡 453007; 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065

摘要:

采用密度泛函B3P86方法在6-311++G(d, p)基组水平上优化得到了沿分子轴方向不同外电场(0-0.04 a.u.)作用下, 甲基乙烯基硅酮分子的基态电子状态、几何结构、电偶极矩和分子总能量. 在优化构型下利用杂化CIS-DFT方法(CIS-B3P86)研究了同样外电场条件下对甲基乙烯基硅酮的激发能和振子强度的影响. 计算结果表明, 分子几何构型与电场大小呈现强烈的依赖关系, 分子偶极矩 μ 随电场的增加先减小后急剧增大. 电场为零时, 分子总能量为-483.5532137 a.u., 随着电场增加, 能量升高, 在 $F=0.02$ a.u.时达到最大值-483.5393952 a.u., 此后, 继续增大电场系统总能量则开始降低. 激发能随电场增加急剧减小, 表明在电场作用下, 分子易于激发和离解.

关键词: 甲基乙烯基硅酮 电场 激发态 杂化CIS-DFT

收稿日期 2006-09-28 修回日期 2006-12-25 网络版发布日期 2007-04-21

通讯作者: 徐国亮 Email: xugliang@hotmail.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(234KB\)](#)

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

[▶ 甲基乙烯基硅酮](#)

[▶ 电场](#)

[▶ 激发态](#)

[▶ 杂化CIS-DFT](#)

本文作者相关文章

[▶ 徐国亮](#)

[▶ 肖小红](#)

[▶ 刘玉芳](#)

[▶ 孙金锋](#)

[▶ 朱正和](#)