

黄金规则用于 $N_3^- + N_3$ 体系电子转移的研究

艾洪奇; 步宇翔

曲阜师范大学化学系, 曲阜 273165; 山东大学理论化学研究所, 济南 250100

摘要:

基于B3P86/6-311+G优化的 N_3 与 $N-3$ 分子几何, 确定了 $N_3 + N-3$ 基态电子转移体系的六种不同的耦合机理, 及各种形式耦合络合物的几何性质、活化能、稳定化能、耦合矩阵元和态密度, 并利用黄金规则计算了电子转移速率, 讨论了各耦合方式对电子转移速率的影响.

关键词: $N_3/N-3$ 体系 密度泛函理论 黄金规则 耦合矩阵元 电子转移速率

收稿日期 2000-08-15 修回日期 2000-10-23 网络版发布日期 2001-03-15

通讯作者: 步宇翔 Email: buyux@ji-public.sd.cninfo.net

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1593KB)

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

▶ $N_3/N-3$ 体系

▶ 密度泛函理论

▶ 黄金规则

▶ 耦合矩阵元

▶ 电子转移速率

本文作者相关文章

▶ 艾洪奇

▶ 步宇翔