

Full Paper

苄基氯光解离的多参考态计算

曹军, 刘亚军\*, 方维海\*

北京师范大学化学学院, 北京 100875

收稿日期 2006-5-24 修回日期 2006-10-20 网络版发布日期 2007-2-9 接受日期

**摘要** 本文用完全活化空间SCF方法研究了苄基氯在248纳米光解离的机理。优化其基态( $S_0$ )和低激发态的几何构型, 计算了低激发态的垂直( $T_v$ )和绝热( $T_0$ )激发能以及在 $S_1$ ,  $T_1$ 和 $T_2$ 态势能面(PES)上解理的反应途径。计算结果清晰解释了苄基氯的光解离机理, 指出发生在 $T_1$ 势能面上的解理是最重要的。

**关键词** [苄基氯, 激发态, 光解离, CASSCF](#)

分类号

## Multireference Calculation of the Photodissociation of Benzyl Chloride

CAO Jun, LIU Ya-Jun\*, FANG Wei-Hai\*

College of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

**Abstract** The photodissociation mechanism of benzyl chloride (BzCl) under 248 nm has been investigated by the complete active space SCF (CASSCF) method by calculating the geometries of the ground ( $S_0$ ) and lower excited states, the vertical ( $T_v$ ) and adiabatic ( $T_0$ ) excitation energies of the lower states, and the dissociation reaction pathways on the potential energy surfaces (PES) of  $S_1$ ,  $T_1$  and  $T_2$  states. The calculated results clearly elucidated the photodissociation mechanism of BzCl, and indicated that the photodissociation on the PES of  $T_1$  state is the most favorable.

**Key words** [benzyl chloride](#) [excited state](#) [photodissociation](#) [CASSCF](#)

DOI:

通讯作者 刘亚军;方维海 [fangwh@bnu.edu.cn](mailto:fangwh@bnu.edu.cn)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“苄基氯, 激发态, 光解离, CASSCF”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [曹军](#)
- [刘亚军](#)
- [方维海](#)