

# 廈門大學

本科畢業論文（設計）  
（主修專業）

中文標題

Title in English

姓 名：

學 號：

學 院：

專 業：

年 級：

校內指導教師： XXX 教授

校外指導教師： (姓名) (職務)



## 厦门大学本科学位论文诚信承诺书

本人呈交的学位论文是在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合相关法律法规及《厦门大学本科毕业论文（设计）规范》。

该学位论文为（XXX 教授）课题（组）的研究成果，获得（XXX 教授）课题（组）经费或实验室的资助，在（XXX 教授）实验室完成（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明）。

本人承诺辅修专业毕业论文（设计）（如有）的内容与主修专业不存在相同与相近情况。

学生声明（签名）：

XXXX 年 XX 月 XX 日



## 知 悉 书

本人 XXXX 年 XX 月开始，在厦门大学化学化工学院 XXX 老师的课题组参与了“标题”等课题的研究，本人知悉这期间在本课题组所接触的数据和工艺等的知识产权均属于厦门大学所有，受相关法律法规的保护。因此，在即将毕业之际，本人特此保证：

- (1) 将本阶段获得的实验数据用于任何目的（如：发表学术论文、会议论文、申请专利、产业化等）之前，需经 XXX 老师的书面许可。
- (2) 不将与实验相关的秘密以任何形式泄露给他人。
- (3) 学位论文、实验数据提供给他人阅读、复制之前，需经 XXX 老师的书面许可。

系别： XXX

专业： XXX

学号： XXX

学生（签字）：

XXXX 年 XX 月

XX 日



## 致 谢

这里是致谢。





## 摘 要

中文摘要。

关键词：中文关键词



## **Abstract**

English abstract.

**Key Words:** Keyword in English



# 目 录

1 一级标题 .....	1
1.1 二级标题 .....	1
1.1.1 三级标题 .....	1
2 其他内容 .....	3
2.1 图片 .....	3
2.2 表格 .....	3
参考文献 .....	5



**Content**

**1 1st title** ..... 1

**1.1 2nd title** ..... 1

        1.1.1 3rd title ..... 1

**2 something else** ..... 3

**2.1 picture** ..... 3

**2.2 table** ..... 3

**References** ..... 5





# 1 一级标题

## 1.1 二级标题

时至今日，含过渡金属体系仍然是理论化学中的圣杯，如金属酶系统<sup>[1]</sup>。强的电子关联作用使得 Hartree-Fock 方法<sup>[2]</sup> 在此处失效。为了弥补 Hartree-Fock 方法缺失的静态和动态电子相关，我们往往需要使用精度更高同时计算量也更高 post-HF 方法以及多参考方法<sup>[3-5]</sup> 来获得化学精度下我们所关心的物理量，但往往这类方法所能计算的实用计算极限往往远远小于实际体系。

但通常的情况是，体系中我们感兴趣的部分往往只是整个体系的一个小部分。于是将两种不同精度和计算量的量子模拟结合起来的想法——即对感兴趣的关键部位应用高精度方法，以及对其余相对不重要的部分应用低精度方法——这正是量子嵌入方法 (Quantum Embedding) 希望达到的目标<sup>[6]</sup>。

### 1.1.1 三级标题

密度泛函嵌入通过欧拉方程 (式公式 1-1) 引入嵌入势，记总电子密度为  $\rho$ ，片段电子密度为  $\rho_A$ ，密度泛函嵌入认为体系总能量  $E[\rho]$  可以分为片段电子密度为  $\rho_A$  贡献的能量  $E[\rho_A]$  和其余部分贡献的能量  $E[\rho, \rho_A]$ ，式中  $\mu$  为化学势。

$$\frac{\delta}{\delta \rho_A} E[\rho] - \mu = \frac{\delta}{\delta \rho_A} [E[\rho_A] + \Delta E[\rho, \rho_A]] - \mu = 0 \quad (\text{公式 1-1})$$

式公式 1-1 中 DFT 能量可被表示为：

$$E[\rho] = T_s[\rho] + J[\rho] + V_{\text{ext}}[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho] \quad (\text{公式 1-2})$$

式子公式 1-2 中  $T_s[\rho]$  表示 Kohn-Sham 动能， $J[\rho]$  表示库伦相互作用能， $V_{\text{ext}}[\rho]$  表示电子与核之间的势能， $E_{\text{xc}}[\rho]$  表示交换相关能。

定义片段 A 的嵌入势  $v_{\text{emb}}$ ：

$$v_A = \frac{\delta \Delta E[\rho, \rho_A]}{\delta \rho_A} \quad (\text{公式 1-3})$$

考虑 DFT 能量表达式 (式公式 1-2)，以及假定我们选取的片段 A 以及整个系统具有整数电子，则片段 A 的嵌入势公式 1-3) 可以被改写为：

$$\begin{aligned} v_A &= \frac{\delta}{\delta \rho_A} [T_s[\rho] - T_s[\rho_A]] + v_J[\rho - \rho_A] + \frac{\delta}{\delta \rho_A} [E_{\text{xc}}[\rho] - E_{\text{xc}}[\rho_A]] \\ &= v_s^A + v_J^A + v_{\text{xc}}^A \end{aligned} \quad (\text{公式 1-4})$$



## 2 其他内容

### 2.1 图片

在本章节中我们讨论的第一个例子是气相中 1, 3, 5-己三烯与氢气的加成反应的能垒，这是氢加成到共轭烃的简化模型，这是许多有机合成路线的必要步骤<sup>[7,8]</sup>。图2-1描绘了加成反应的示意图。分子的很大一部分涉及共轭  $\pi$  键，这对

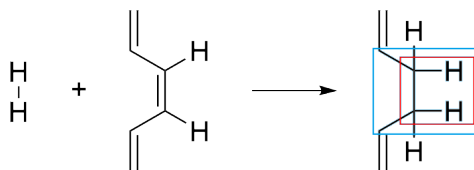


图 2-1: 这里是图片注释。

许多量子嵌入方法来说都是比较难以解决的问题。此外，过渡态（定义为势能表面的一阶鞍点）对于一些简单电子结构方法来说也难以描述清楚。

### 2.2 表格

表 2-1: 这里是表格注释。

方法/基组	$E_{RS}$ (Hartree)	$E_{TS}$ (Hartree)	$\Delta E$ (kcal/mol)	CPU time (s)
ROHF/def2svp	-2831.2668477	-2831.1564060	69.3032	$1.103 \times 10^5$
UKS/def2svp	-2840.7439266	-2840.7098161	21.4047	$1.810 \times 10^5$
CAS(9o,11e)/def2svp	-2831.3552550	-2831.3190575	22.7140	$7.938 \times 10^5$
DMET(9o,11e)/def2svp	-2831.3520451	-2831.3156374	22.8462	$1.903 \times 10^5$



## 参考文献

- [1] Tang M C, Zou Y, Watanabe K, et al. Oxidative cyclization in natural product biosynthesis [J]. Chemical Reviews, 2017, 117(8):5226-5333.
- [2] Slater J C. A simplification of the hartree-fock method [J]. Physical Review, 1951, 81(3):385.
- [3] Mejuto-Zaera C, Tzeli D, Williams-Young D, et al. The effect of geometry, spin, and orbital optimization in achieving accurate, correlated results for iron–sulfur cubanes [J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2022, 18(2):687-702.
- [4] Weser O, Guthier K, Ghanem K, et al. Stochastic generalized active space self-consistent field: Theory and application [J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2021, 18(1):251-272.
- [5] Dobrautz W, Weser O, Bogdanov N A, et al. Spin-pure stochastic-casscf via guga-fciqmc applied to iron–sulfur clusters [J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2021, 17(9):5684-5703.
- [6] Sun Q, Chan G K L. Quantum embedding theories [J]. Accounts of Chemical Research, 2016, 49(12):2705-2712.
- [7] Stawski W, Hurej K, Skonieczny J, et al. Organoboron complexes in edge-sharing macrocycles: The triphyrin (2.1. 1)–tetraphyrin (1.1. 1.1) hybrid [J]. Angewandte Chemie, 2019, 131(32):11062-11066.
- [8] Liang Y, Chen Z, Jing Y, et al. Heavily n-dopable  $\pi$ -conjugated redox polymers with ultrafast energy storage capability [J]. Journal of the American Chemical Society, 2015, 137(15):4956-4959.