

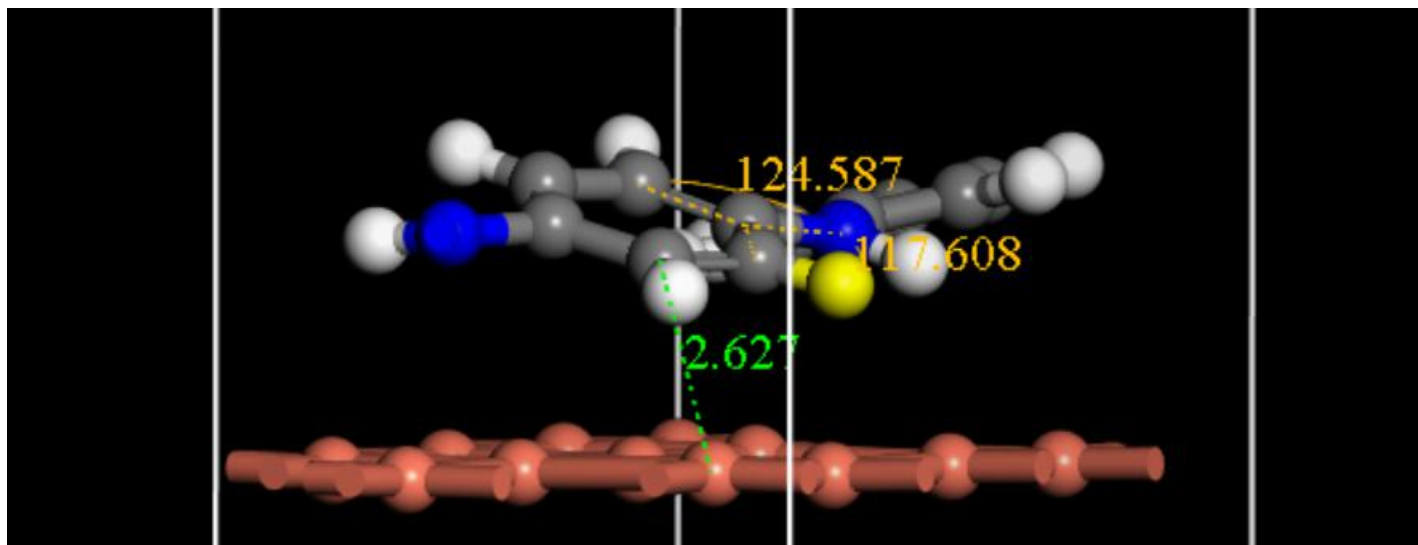
模拟前

在首次模拟中（投入：4层铜电极，聚苯胺（两基本单元））

优化结果

1)

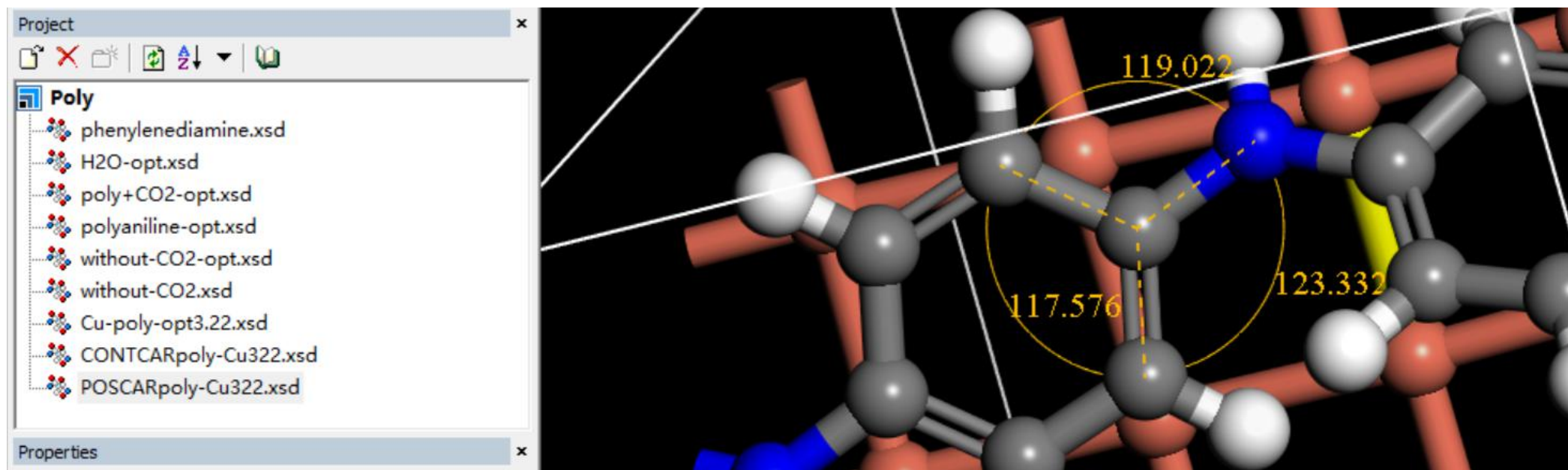
聚苯胺整体与铜电极距离拉近（ $<2.6\text{\AA}$ ），碳/氮原子对铜电极的作用差别不明显



2)

聚苯胺分子发生了变化，首先是C-C-N的键角：

POSCAR



CONTCUR

Project

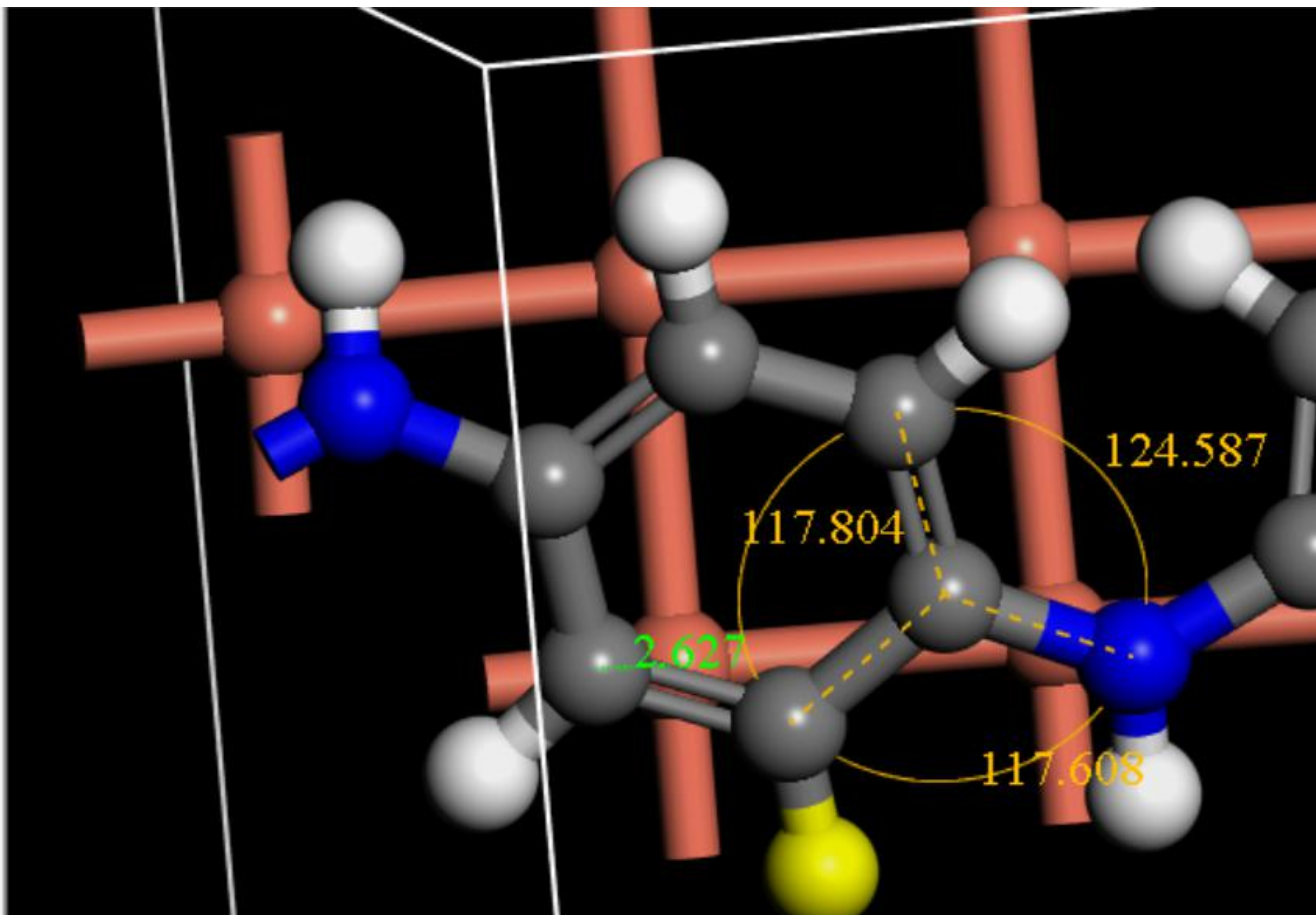
poly

- phenylenediamine.xsd
- H2O-opt.xsd
- poly+CO2-opt.xsd
- polyaniline-opt.xsd
- without-CO2-opt.xsd
- without-CO2.xsd
- Cu-poly-opt3.22.xsd
- CONTCARpoly-Cu322.xsd
- POSCARpoly-Cu322.xsd

Properties

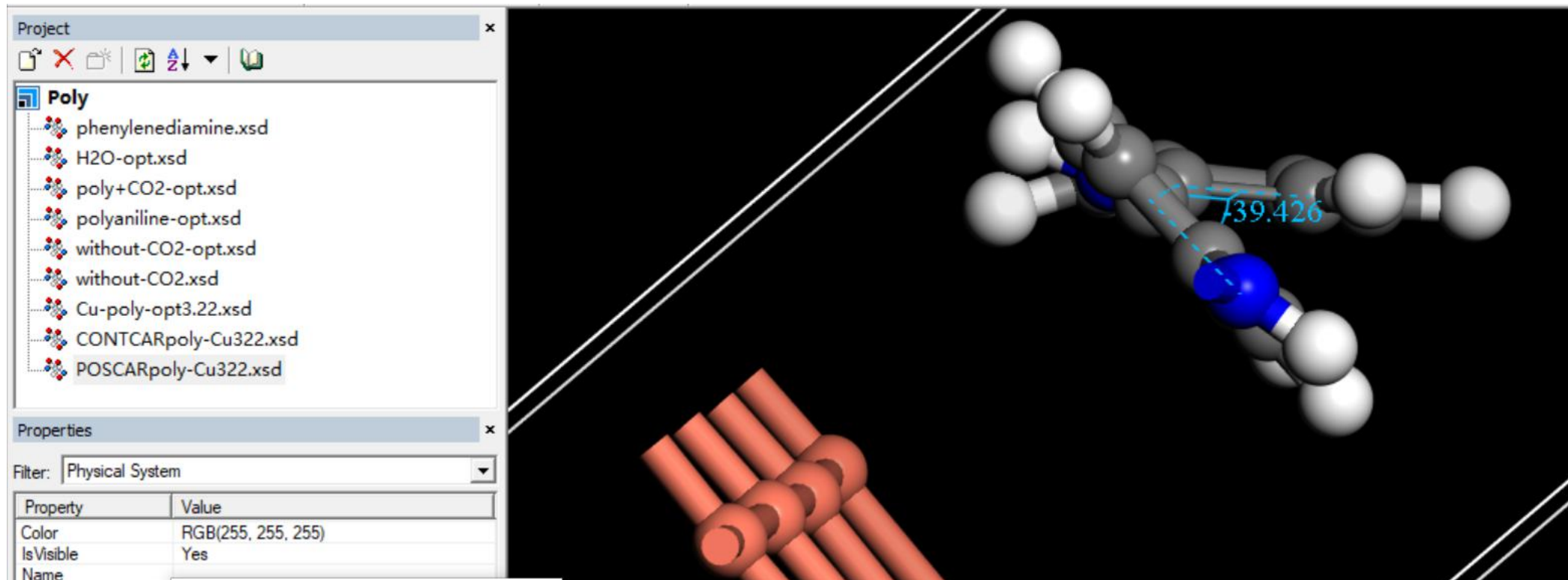
Filter: Atom

| Property | Value |
|-------------|--------------------|
| Charge | 0.000000 |
| Color | RGB(255, 255, 255) |
| Composition | H |
| ElementName | Hydrogen |

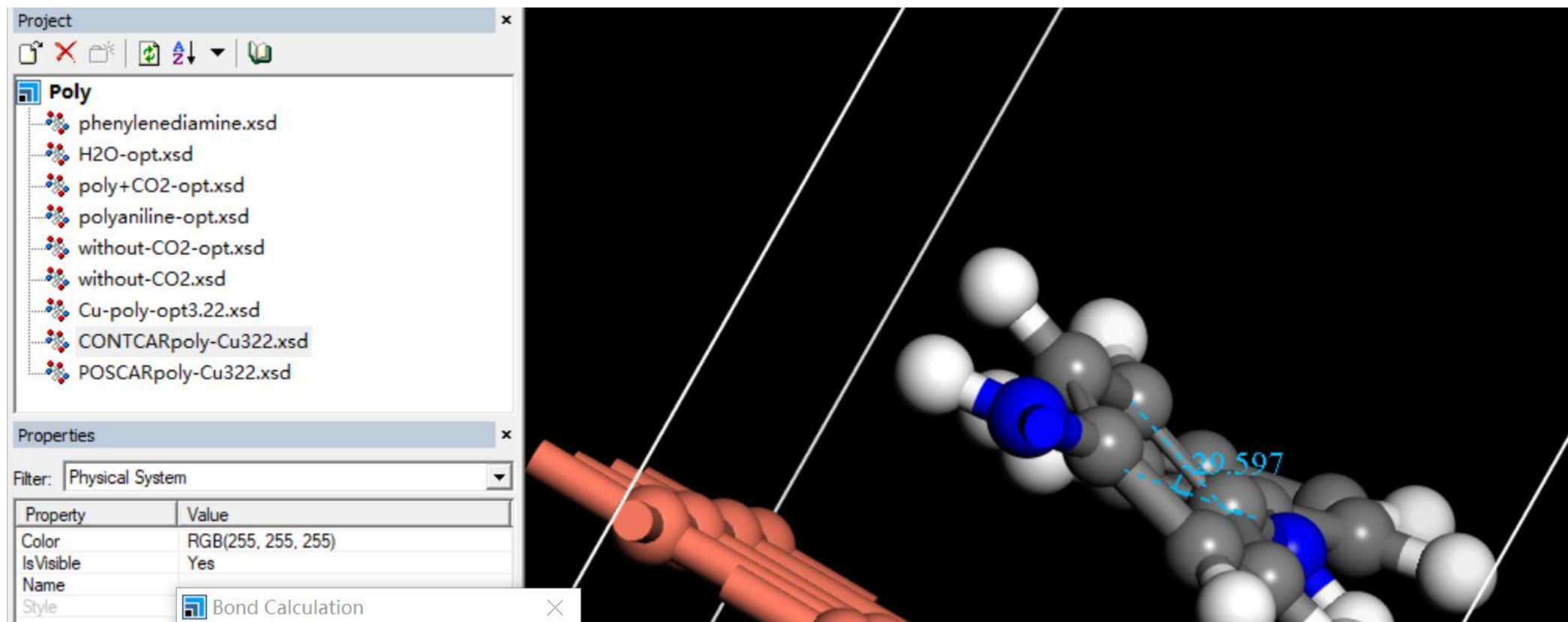


最大的结构变化是苯环平面夹角变化:

POSCAR

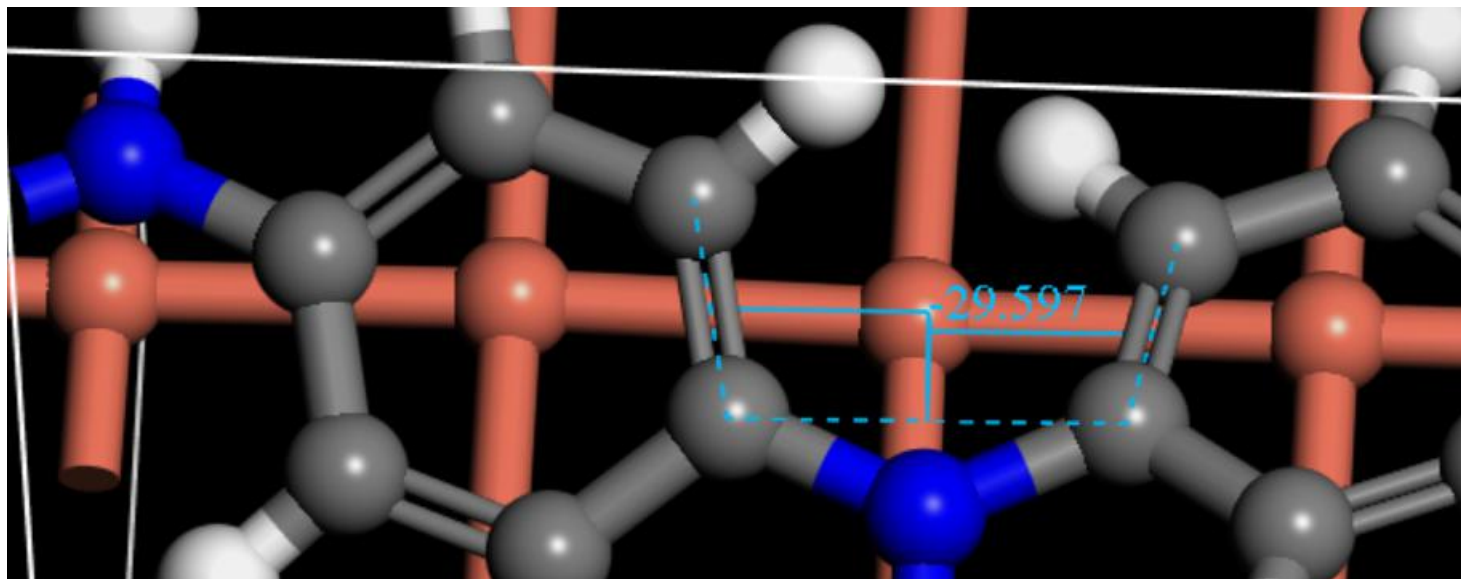


CONTCUR



从39度下降到29度

选取的测量原子：



苯环面间夹角变小体现了聚苯胺共轭性增强

针对此现象，目前提出假设是铜与苯环体系作用，引起苯环电子密度下降，N富电子导致向 sp^2 杂化变化，进而促进了体系的共轭

接下来的实验计划：

抬高铜电极表面电势，研究聚苯胺——铜系统的作用变化。从-1V~1V取6组进行实验比较。