

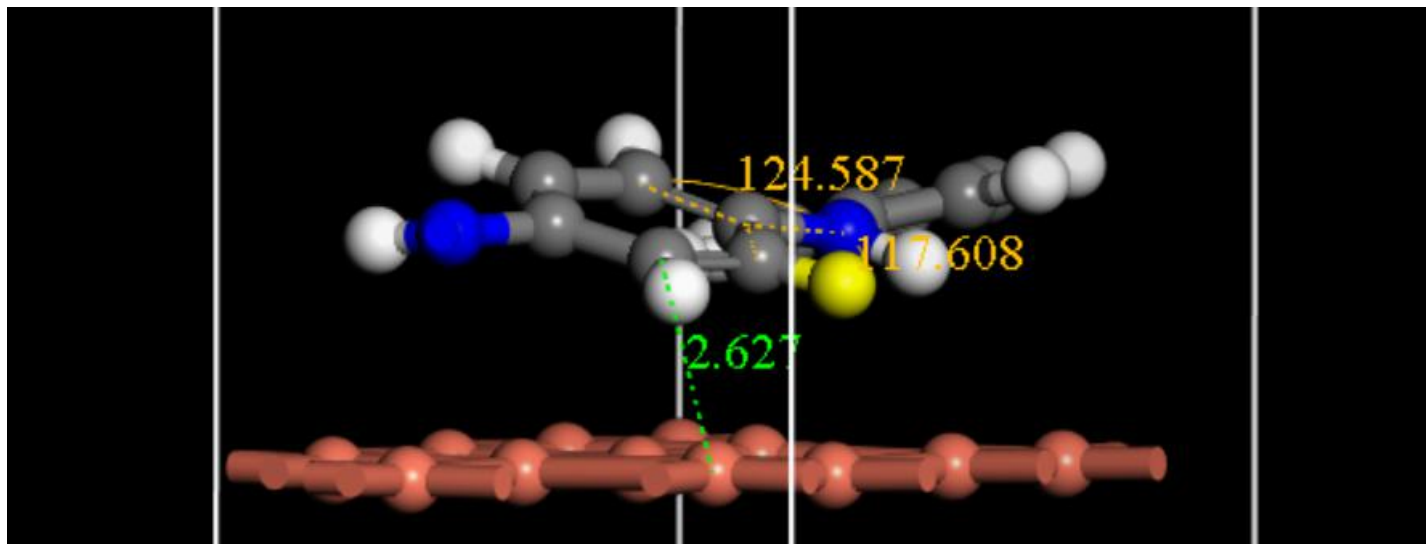
## 模拟前

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)

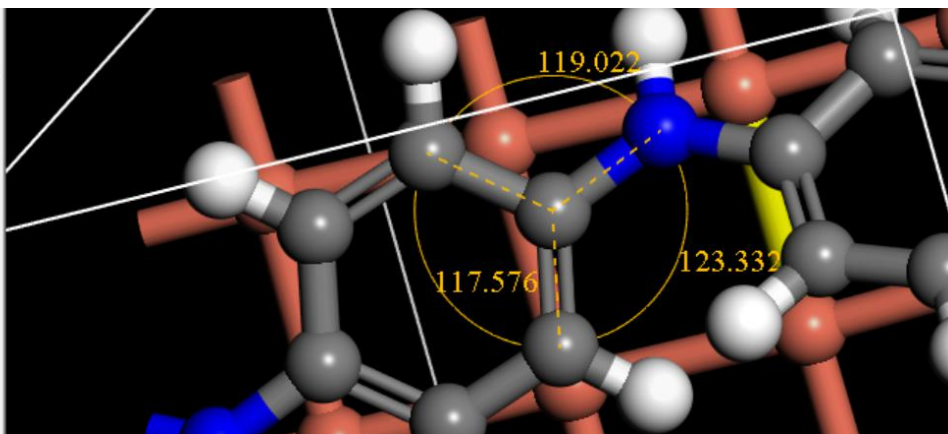
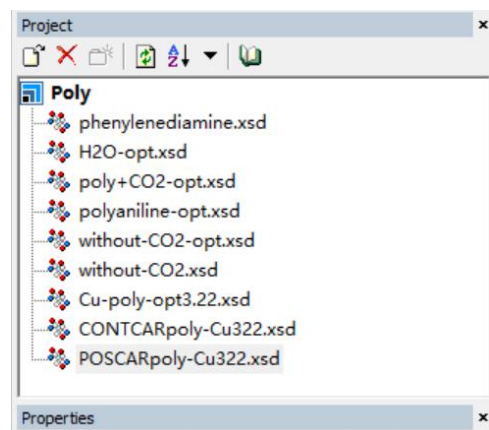
聚苯胺整体与铜电极距离拉近（ $< 2.6\text{\AA}$ ），碳/氮原子对铜电极的作用差别不明显



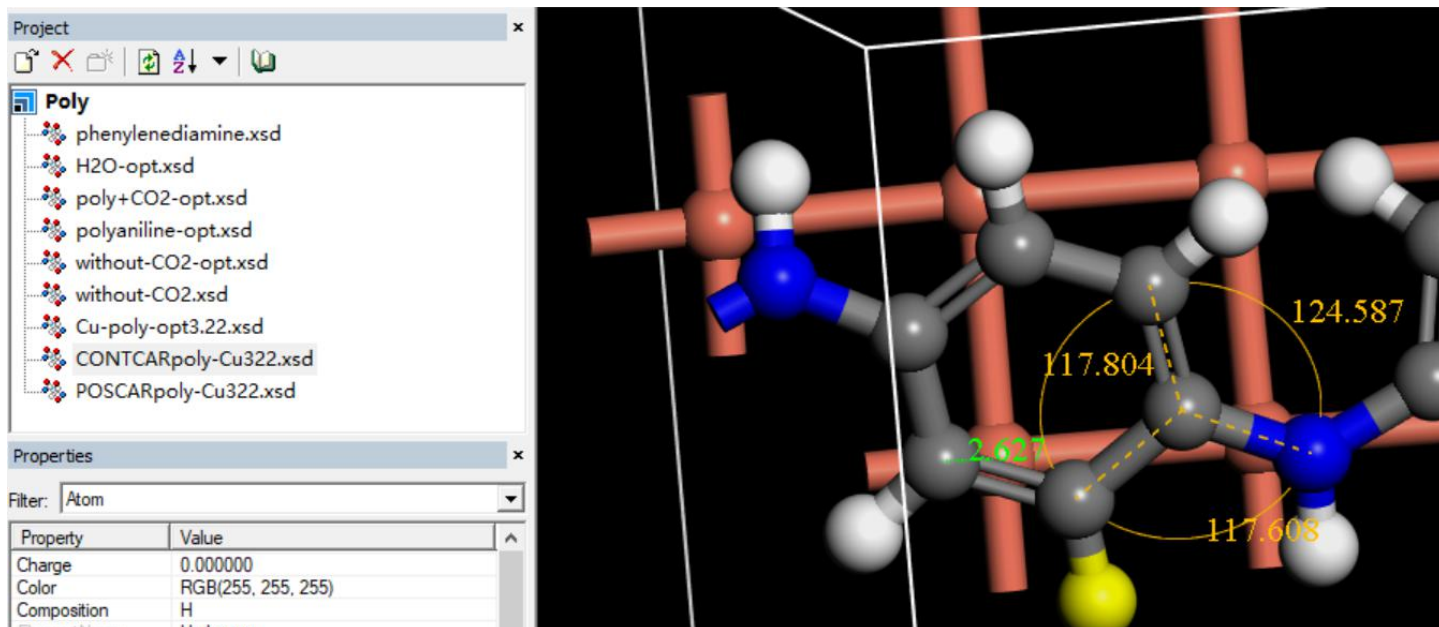
2)

聚苯胺分子发生了变化，首先是C-C-N的键角：

POSCAR

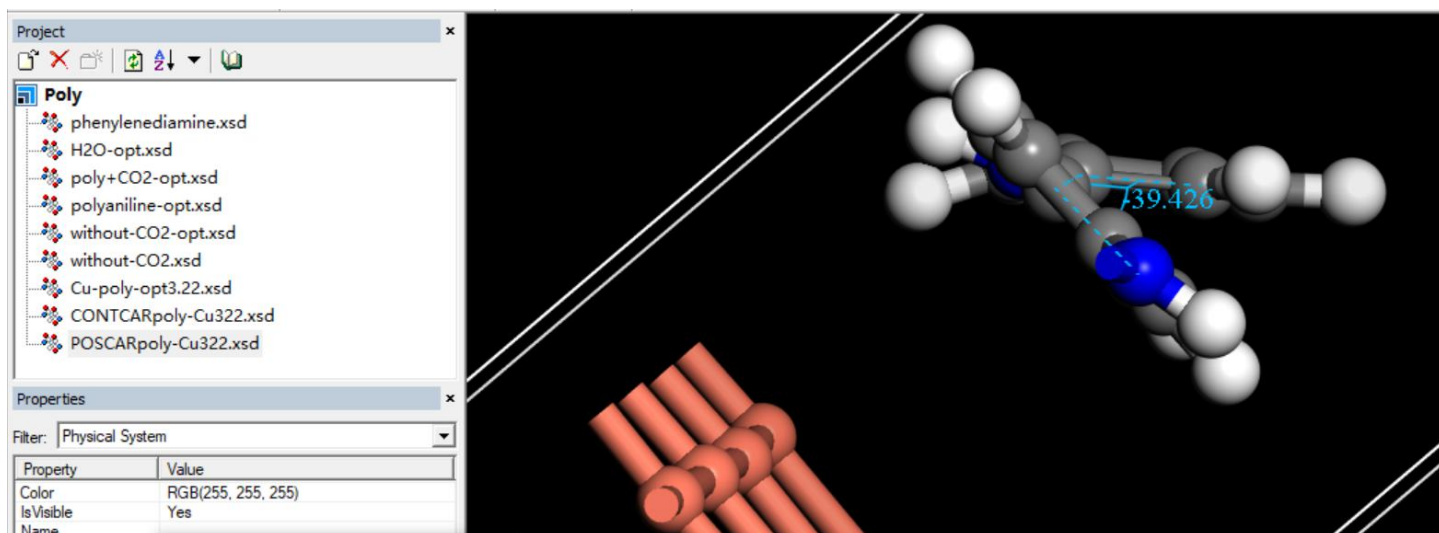


CONTCUR

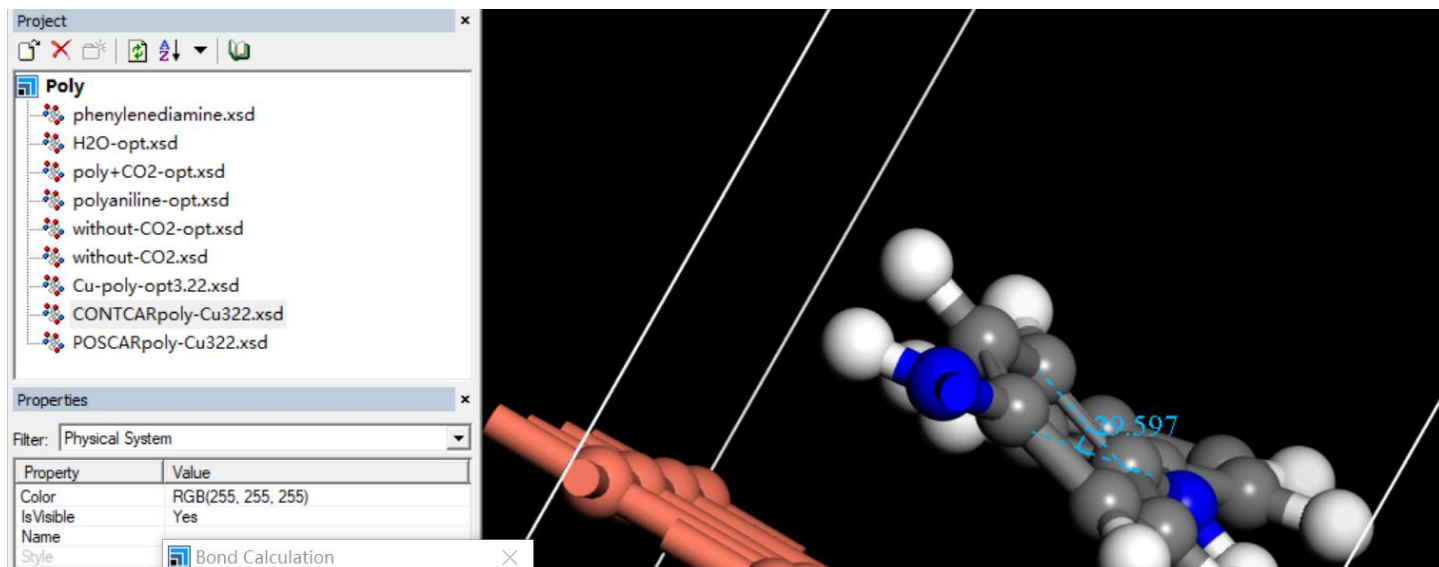


最大的结构变化是苯环平面夹角变化:

POSCAR

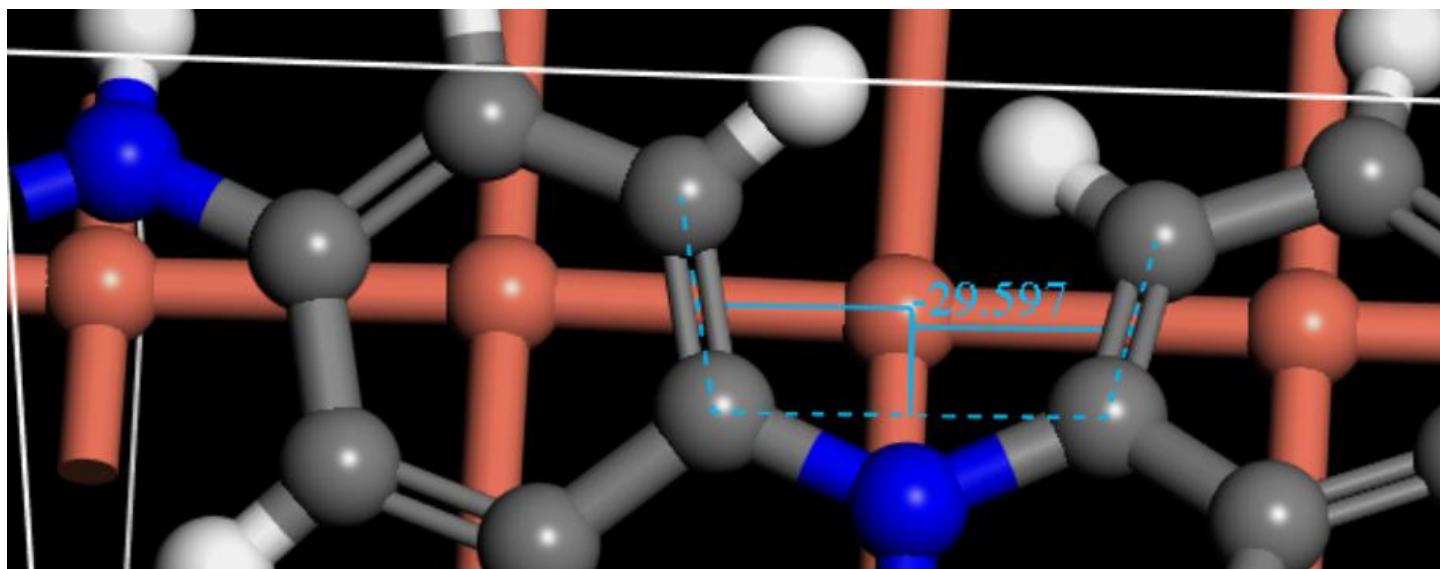


CONTCUR



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。