

## $B_4^+$ 分子的稳定构型和电子结构特征

杨传路, 张志红, 徐强, 龚玉兵, 任廷琦

烟台师范学院物理系 山东烟台

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

### 摘要

在QCISD/6 3 1 1G 水平上研究了 $B_4^+$  分子的各种稳定构型. 首先通过从头计算优化出可能的稳定构型, 再通过振动频率的计算判断所得构型是局部极小或鞍点. 同时讨论了Jahn Teller效应. 通过比较发现从头计算得到的各种构型与群论的结果一致, 并得出一些文献中报道的构型实际上是鞍点. 首次报道了非平面的 $C_{2v}$ 构型.

An ab initio study is made of the Jahn Teller distortion of the  $B_4^+$  molecule using quadratic configuration interaction with all single and double substitutions (QCISD) and 6 311G \* basis set. For this cation, the  $D_{2h}$  (rectangle and rhombus),  $D_{4h}$ ,  $C_{2v}$  (planar and non planar),  $D_{\infty h}$  structure are full optimized and analyzed using energies, bond lengths and angles, harmonic frequencies and group theory. The present results predict a new stationary point structure of...

关键词  [\$B\_4^+\$ 分子](#) [从头计算](#) [JahnTeller效应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 杨传路; 张志红; 徐强; 龚玉兵; 任廷琦

### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF \(767KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)

▶ [参考文献 \[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“ \$B\_4^+\$ 分子”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [杨传路](#)

· [张志红](#)

· [徐强](#)

· [龚玉兵](#)

· [任廷琦](#)