

单取代苯的多重散射 $X\alpha$ 研究

闵新民,江元生

吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 多重散射 $X\alpha$ 方法讨论了氟苯、苯胺、硝基苯和苯腈的电离能、 π 轨道的电荷分布、 π 轨道的系数及等值图形. 表明多重散射 $X\alpha$ 方法的波函数和电荷分布在描述取代苯活化位置方面存在某种局限性, 讨论了改善的可能途径.

关键词 [计算](#) [硝基苯](#) [电离能](#) [波函数](#) [从头计算法](#) [分子轨道理论](#) [苯胺](#) [电荷分布](#) [自洽场](#) [多重散射](#) [苯甲腈](#) [P](#)

分类号 [0641](#)

A $ms X\alpha$ study of monosubstituted benzenes

MIN XINMIN,JIANG YUANSHENG

Abstract The ionization potentials, p charge distribution, p orbital coefficients, and contour maps of fluorobenzene, aniline, nitrobenzene, and benzonitrile are studied using the MS $X\alpha$ method. Results are compared with those of ab initio calcns. as well as experiments Ab initio calcns. are superior to MS $X\alpha$ calcns. Some possible improvements are discussed.

Key words [CALCULATION](#) [NITROBENZENE](#) [IONIZATION ENERGY](#) [WAVE FUNCTIONS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ANILINE](#) [CHARGE DISTRIBUTION](#) [SELF-CONSISTENT FIELD](#) [MULTIPLE SCATTERING](#) [BENZONITRILE](#) [P](#)

DOI:

通讯作者

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“计算”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [闵新民](#)

· [江元生](#)