

C~1~2~0O的分子结构和光谱性质的理论研究

田维全,封继康,葛茂发,任爱民,孙秀云,黄旭日,李志儒

吉林大学·长春(130023);理论化学计算国家重点实验室;吉林大学超分子结构及谱学开放实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用INDO系列方法对双笼氧化物C~1~2~0O进行了理论研究,结果表明:

双笼氧化物C~1~2~0O的形成缓解了C~6~0O中环氧三元环的角张力,

并形成了呋喃型五元环将两碳笼连接在一起。两碳笼的直接键连使两笼距离较近,有较弱的相互作用,

但仍各自表现一定的独立性,C~1~2~0O可发生分解生成新的化合物,C~1~2~0O的电子光谱与母体分子C~6~0O相似。

关键词 [C~1~2~0O](#) [双笼氧化物](#) [光谱特性](#) [分子结构](#) [电子光谱学](#) [富勒烯](#) [笼状结构](#)

[国家教委高等学校博士学科点专项科研基金](#)

分类号 [0641](#)

Theoretical study on the structure and spectra of C~1~2~0O

Tian Weiquan,Feng Jikang,Ge Maofa,Ren Aimin,Sun Xiuyun,Huang Xuri,Li Zhiru

Jilin Univ..Changchun(130023)

Abstract The double cages oxide C~1~2~0O was investigated by INDO series methods, the results suggested that: the formation of C~1~2~0O reduced the angle constraint at the three-membered ring of epoxide in C~6~0O and the furane ring connected the two C~6~0 cages together. The direct connection of the two C~6~0 cages rendered the two cages interact weakly to each other, however, the two cages still behaved with certain independence to each other. C~1~2~0O could discompose to new compounds. the electronic spectra of C~1~2~0O were analogous to those of parent C~6~0O.

Key words [SPECTRAL CHARACTERISTICS](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [ELECTRON SPECTROSCOPY](#) [FULLERENES](#) [CAGE STRUCTURE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(832KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“C~1~2~0O” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [田维全](#)
- [封继康](#)
- [葛茂发](#)
- [任爱民](#)
- [孙秀云](#)
- [黄旭日](#)
- [李志儒](#)