

有机金属化合物的振动光谱 I: 环戊二烯夹心化合物的力常数计算

冯艳, 刘举正, 赵文运, 张刚, 梁映秋

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 测定了过渡金属环戊二烯夹心化合物的红外与激光拉曼光谱, 在此基础上, 用 G-F 矩阵法计算了这类化合物的力常数, 讨论了环戊二烯与金属间化学键的性质.

关键词 [计算](#) [环戊二烯](#) [P](#) [光谱分析](#) [有机金属化合物](#) [金属茂络合物](#) [振动谱](#) [力常数](#)

分类号 [0627](#)

The vibrational spectra of organometallic compounds I: On the calculation of force constant for metallocene

FENG YAN, LIU JUZHENG, ZHAO WENYUN, ZHANG GANG, LIANG YINGQIU

Abstract On the basis of FT-IR and laser Raman spectra of (h⁵-Cp)₂M (Cp = C₅H₅; M = Mn, Fe, Ru), the force constants of the given compounds have been calculated by a G-F matrix program and the nature of the Cp-M chem. bond has been discussed.

Key words [CALCULATION](#) [CYCLOPENTADIENE](#) [P](#) [SPECTROGRAPHIC ANALYSIS](#) [ORGANOMETALLIC COMPOUNDS](#) [METALLOCENES](#) [VIBRATIONAL SPECTRA](#) [FORCE CONSTANT](#)

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

- [冯艳](#)
- [刘举正](#)
- [赵文运](#)
- [张刚](#)
- [梁映秋](#)