

C4O4^m-(m=0, 1, 2, 3, 4)的从头算研究: 2. 化学键、电离势 和振动频率

周立新, 黄尊行, 章永凡, 李俊Qian, 田安民

福州大学化学系结构化学国家重点实验室; 四川大学化学系. 成都(610064)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在第1报优化的几何构型的基础上, 用Boys定域化方法和QSU90程序计算了C4O4^m-(m=0, 1, 2, 3, 4)的定域化分子轨道, 讨论了其成键特征和电离势。在6-31G水平用abinitio解析方法计算它们的谐振动频率。

关键词 [氧碳化合物](#) [环状化合物](#) [芳香族化合物](#) [从头计算法](#) [结构化学](#) [电离势](#) [振动频率](#) [成键](#)

分类号 [0621.16](#)

Ab initio study of C4O4^m-(m=0, 1, 2, 3, 4): 2. The bonding, ionization potential and vibrational frequency

Zhou Lixin, Huang Zunxing, Zhang Yongfan, LI JUNQia, Tian Anmin

Sichuan Univ, Dept Chem. Chengdu(610064)

Abstract The electronic structures and ionization potentials of C4O4^m-(m=0, 1, 2, 3, 4) are calculated at the RHF(UHF)/6-31G, RHF(UHF)6-31G* and RHF(UHF)6-31+G levels using ab initio SCF and Boys localized molecular orbital (LMO) approaches. The characteristic of bonding and the relationship between ionization potential and corresponding ΔE_{S-C-F} are discussed. Vibrational frequencies, IR intensities and intrinsic frequencies and force constants have also been calculated at the 6-31G level by analytical second derivatives at the optimized equilibrium geometries. The results of the electronic structures and Boys LMO calculations and the vibrational analyses are consistent with the optimized equilibrium geometries.

Key words [CYCLIC COMPOUNDS](#) [AROMATIC COMPOUNDS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [STRUCTURAL CHEMISTRY](#) [IONIZATION POTENTIAL](#) [FREQUENCY OF VIBRATION](#) [BONDING](#)

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“氧碳化合物”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [周立新](#)
- [黄尊行](#)
- [章永凡](#)
- [李俊Qian](#)
- [田安民](#)