

卤代甲烷的赝势从头算研究I. CH_3X ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 的化学键 和电离势

耿志远,王永成,韦统师

西北师范学院化学系,兰州(730070)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 我们使用相对论赝势从头计算方法系统地研究了 CH_3X ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 系列分子的电子结构及其变化规律,并根据Koopmans定理指定了光电子能谱。

关键词 [电离势](#) [化学键](#) [从头算](#) [赝势](#) [卤代烷](#) [电子结构](#) [相对论赝势](#)

分类号 [0641](#)

Pseudopotential ab initio study on methyl halides

Geng Zhiyuan, Wang Yongcheng, Wei Tongshi

NW Normal Univ, Dept Chem, Lanzhou(730070)

Abstract The relativistic effective core potential ab initio was used on CH_3X ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$). It is found that the σ -bonding increases and π -bonding decreases by degrees between the C and X from CH_3F to CH_3I . The photoelectron spectra of CH_3X were assigned.

Key words [IONIZATION POTENTIAL](#) [CHEMICAL BONDS](#) [PSEUDO POTENTIAL](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#)

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“电离势”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [耿志远](#)

· [王永成](#)

· [韦统师](#)