

戊烯自由基阳离子的密度泛函理论研究

赵彦英; 刘亚军; 郑世钧; 黄明宝; 孟令鹏

河北师范大学计算量化研究室, 石家庄 050091; 中国科学院研究生院化学部, 北京 100039

摘要:

使用密度泛函理论B3LYP方法和6-31G(d,p)、6-31+G(d,p)、6-311G(d,p)及6-311+G(d,p)基组, 分别对2-C5H10+和1-C5H10+的各种构象进行了几何构型优化, 并用B3LYP/6-311G(d,p)进行了频率分析计算. 计算预言1-C5H10+具有非平面构型, 与以往报导的从头算计算结论相反. 在两个构象的B3LYP几何构型上, 进行了B3LYP和UMP2(full)方法的超精细耦合常数计算, 得到了比以往更好的结果.

关键词: 戊烯自由基阳离子 密度泛函理论 超精细结构

收稿日期 2002-03-19 修回日期 2002-06-13 网络版发布日期 2002-12-15

通讯作者: 郑世钧 Email: sjzheng@hebtu.edu.cn

本刊中的类似文章