

引用信息: Cao Ze-Xing; Liang Guo-Ming; Tian An-Min; Yan Guo-Sen; Tang Ao-Qing; Li Qian-Shu. Acta Phys. -Chim. Sin., 1993, 9(06): 770-775 [曹泽星;梁国明;田安民;鄢国森;唐敖庆;李前树. 物理化学学报, 1993, 9(06): 770-775]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

线形碳元素簇合物的成键性质

曹泽星; 梁国明; 田安民; 鄢国森; 唐敖庆; 李前树

四川大学化学系, 成都 610064; 吉林大学化学系, 长春 130023

摘要:

在ab initio 3-21G水平上, 用能量梯度法优化了线性碳元素簇合物 C_n-e (n 为成簇原子个数, e 为电荷)的平衡几何结构. 所得的电离势随成簇原子个数的改变, 呈现出不同程度的奇偶交替变化趋势. 在ab initio计算基础上, 用Boys方法, 对其占据正则分子轨道进行定域化变换, 得到了它们的定域分子轨道. 对定域分子轨道性质的分析表明, 线性碳元素簇合物中, 主要键型有双中心 σ 和 n 键, 双中心弯键和三中心香蕉键, 以及多中心 σ 和 n 键. 这种键型的多样化可视为小元素簇的成键特征. 此外, 通过对其成键性质的分析, 讨论了线性碳元素簇的稳定性. 对于小碳元素簇, 化学键的共轭性对其稳定性具有十分显著的作用.

关键词: 碳元素簇 电离势 Boys定域化 化学键

收稿日期 1992-04-29 修回日期 1992-09-25 网络版发布日期 1993-12-15

通讯作者: 田安民 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1271KB\)](#)

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](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [碳元素簇](#)

▶ [电离势](#)

▶ [Boys定域化](#)

▶ [化学键](#)

本文作者相关文章

▶ [曹泽星](#)

▶ [梁国明](#)

▶ [田安民](#)

▶ [鄢国森](#)

▶ [唐敖庆](#)

▶ [李前树](#)