

量子化学从头计算法研究C<sub>84</sub>的分子静电势

王一波

贵州大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 取价层双ζ基(7s4p)/[3s2p]从头计算法优化的分子几何构型,在Hartree-Fock/6-31G水平,分别计算了Fullerene C<sub>84</sub>的D<sub>2d</sub>和D<sub>2</sub>点群对称性的两种稳定异构体的分子静电势,获得了过C<sub>84</sub>对称中心的三个正交平面XY, XZ和YZ上的平面静电势图和径向静电势图,并与其它Fullerene的静电势做了比较。

关键词 [从头计算法](#) [分子静电势](#) [其它基金](#) [富勒烯 P](#)

分类号 [0641](#)

## Ab initio calculation study on the molecular electrostatic potentials of C<sub>84</sub> fullerene

WANG YIBO

**Abstract** All-electron ab initio calculations carried out at the Hartree-Fock level employing 6-31G basis set at the HF/DZ optimized geometrical structures to determine the molecular electrostatic potentials (MEP) of the D<sub>2d</sub> and D<sub>2</sub>-d symmetry isomers of C<sub>84</sub> fullerene. The planiform and radial maps of the MEP are listed in the article. Comparisons of the MEP for D<sub>2</sub>, D<sub>2d</sub> isomers of C<sub>84</sub> and other fullerenes are made.

**Key words** [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ELECTROSTATIC POTENTIAL](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(283KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“从头计算法”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王一波](#)