

卤代甲烷的赝势从头算研究 II. 二卤代甲烷的化学键和电离势

耿志远, 王永成, 韦统师

西北师范学院化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文应用相对论赝势ab initio方法对 $\text{CH}_2\text{X}_2$  ( $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ )

系列分子电子结构的变化规律进行了系统地研究, 并根据Koopmans定理重新指定了光电子能谱.

关键词 [二氯甲烷](#) [化学键](#) [电子结构](#) [从头算法](#) [光电子谱法](#) [电离势](#) [二氟甲烷](#) [二溴甲烷](#)  
[二卤代甲烷](#) [相对论赝势](#) [二碘甲烷](#)

分类号 [0641](#)

## Pseudopotential ab initio study on halogenated methanes II .the bonding and the ionization potential of $\text{CH}_2\text{X}_2$ ( $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ )

GENG ZHIYUAN, WANG YONGCHENG, WEI TONGSHI

**Abstract** The electronic structures and the ionization potential of  $\text{CH}_2\text{X}_2$  ( $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) were calculated using relativistic effective core potentials (ECPs) ab initio method. The characteristics of bonding were discussed and the photoelectron spectra of  $\text{CH}_2\text{X}_2$  were reassigned

**Key words** [DICHLOROMETHANE](#) [CHEMICAL BONDS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY](#) [IONIZATION POTENTIAL](#) [DIFLUOROMETHANE](#) [DIBROMOMETHANE \(= METHYLENE BROMIDE\)](#) [DIODOMETHANE \(=METHYLENE IODIDE\)](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(253KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“二氯甲烷”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [耿志远](#)

· [王永成](#)

· [韦统师](#)