

卤代甲烷的赝势从头算研究I. $\text{CH}_3\text{X}(\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I})$ 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 $\text{CH}_3\text{X}(\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I})$ 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 $\text{CH}_3\text{X}(\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I})$. 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](#)