

开环夹心化合物 **IX. STO-3G**从头计算法研究戊二烯负离子及其甲基取代衍生物的构象

张韞宏,刘举正,于恒泰,王志忠,唐敖庆

吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用STO-3G基组的从头计算和DFP梯度几何优化方法对戊二烯负离子(C₅H₇⁻)及其甲基取代衍生物进行了骨架优化。得到C₅H₇⁻

构象异构体的稳定顺序为W>S>U。而甲基取代的戊二烯负离子,其顺序取决于甲基取代的位置。

关键词 [梯度](#) [异构体](#) [从头计算法](#) [戊二烯](#) [戊二烯 P](#) [构象](#) [夹心化合物](#) [开环化合物](#)

分类号 [0641](#)

Open metallocene. IX. Ab initio study of conformations of pentadienyl anion and its methyl substituted derivatives

ZHANG YUNHONG, LIU JUZHENG, YU HENGTAI, WANG ZHIZHONG, TANG AOQING

Abstract ab initio Calculation with STO-3G basis sets and DFP geometry optimization method were used to study conformation stability of pentadienyl anion and its Me substituted derivatives For pentadienyl anion, the stability sequence is W>S>U. But for the Me substituted derivatives of pentadienyl anion, the stability sequence is determine by the positions of the Me group.

Key words [GRADIENTS](#) [ISOMER](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [PENTADIENE](#) [PENTADIENE P](#) [CONFORMATION](#) [SANDWICH COMPOUNDS](#) [RING OPEN COMPOUNDS](#)

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“梯度”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [张韞宏](#)
- [刘举正](#)
- [于恒泰](#)
- [王志忠](#)
- [唐敖庆](#)