

光谱学与光谱分析

(1, 2- μ_2 -L1)(1, 2- μ_2 -L2)十羰基合三钷振动光谱的理论计算[L1, L2=H, Cl, Br, I]

曾荣英¹, 邝代治¹, 义祥辉², 侯若冰²

1. 衡阳师范学院化学与材料科学系, 湖南 衡阳 421008

2. 广西师范大学化学系, 广西 桂林 541004

收稿日期 2004-3-16 修回日期 2004-6-26 网络版发布日期 2005-6-26

摘要 用密度泛函理论和从头计算(*ab initio*)方法, 在B3LYP/CEP-4G, B3LYP/LanL2DZ和RHF/CEP-4G, RHF/LanL2DZ水平上, 全优化计算了(1, 2- μ_2 -H)(1, 2- μ_2 -L)Os₃(CO)₁₀(L: Cl, Br, I)的分子几何构型和电子结构;在RHF/CEP-4G水平上, 全优化计算了(1, 2- μ_2 -L)₂Os₃(CO)₁₀(L: H, Cl, Br, I)的分子几何构型和电子结构。计算结果表明, 在这些体系中, 电子由Os(CO)₃向Os(CO)₄转移。用RHF/CEP-4G对这七个簇合物进行了简正振动频率分析, 在计算得到振动频率及吸收强度的基础上, 模拟了稳定平衡结构的红外光谱图, 并对计算结果进行了比较和讨论。

关键词 [\(1,2- \$\mu_2\$ -L1\)\(1,2- \$\mu_2\$ -L2\)十羰基合三钷\[L1,L2=H,Cl,Br,I\]](#) [密度泛函理论](#) [从头计算方法](#) [分子几](#)

[何构型](#) [电子结构](#) [红外振动频率](#)

分类号 [O641.4](#)

DOI:

通讯作者:

曾荣英

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(644KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ 本刊中 包含“(1,2- μ_2 -L1)(1,2- μ_2 -L2)十羰基合三钷[L1,L2=H,Cl,Br,I]”的 [相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [曾荣英](#)

· [邝代治](#)

· [义祥辉](#)

· [侯若冰](#)