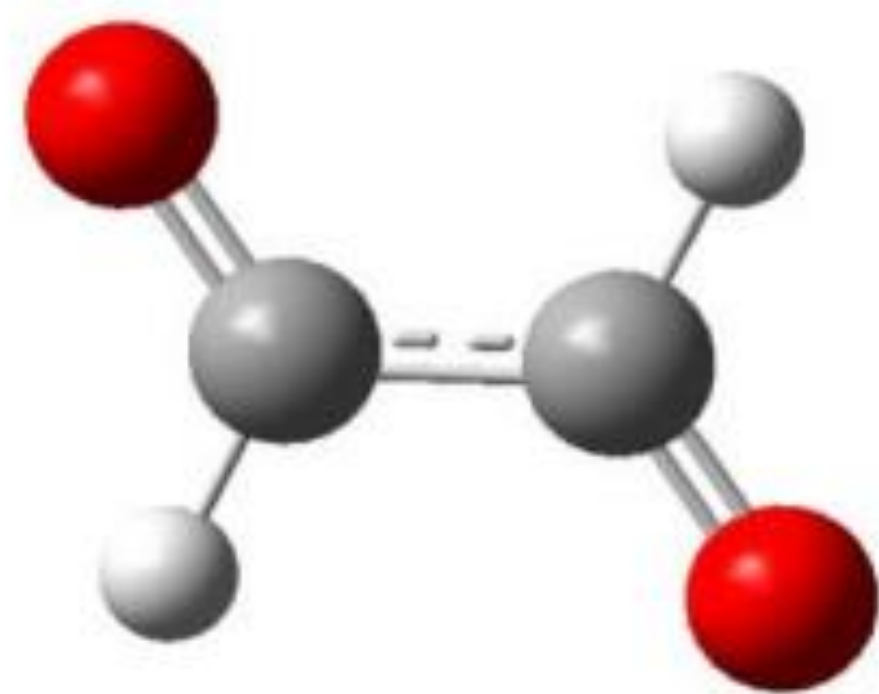


乙二醛陰離子光電子光譜計算



科學教育與應用學系 任珮臻、邱能傑、李旻軒

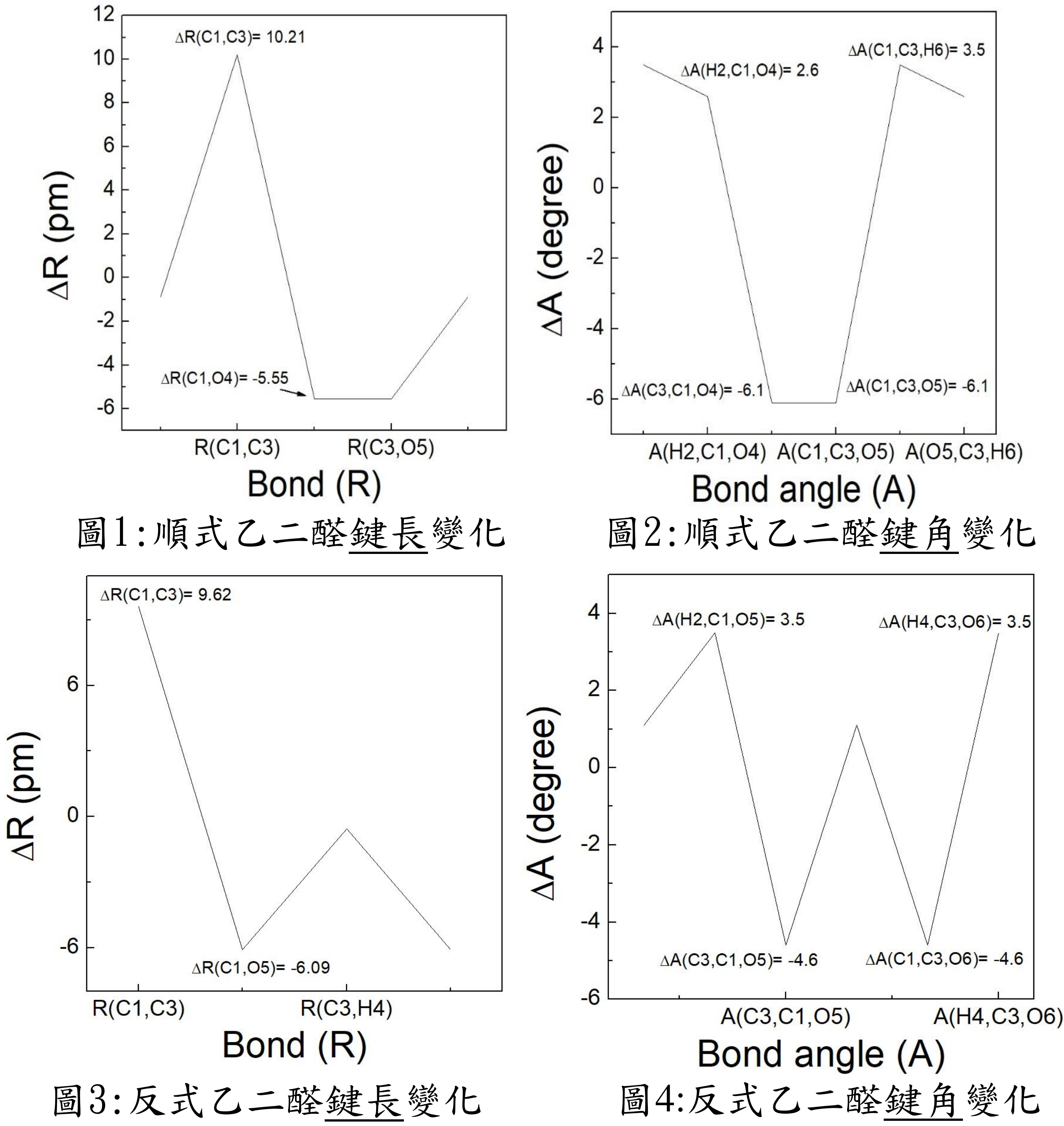
指導教授 張嘉麟 教授

摘要

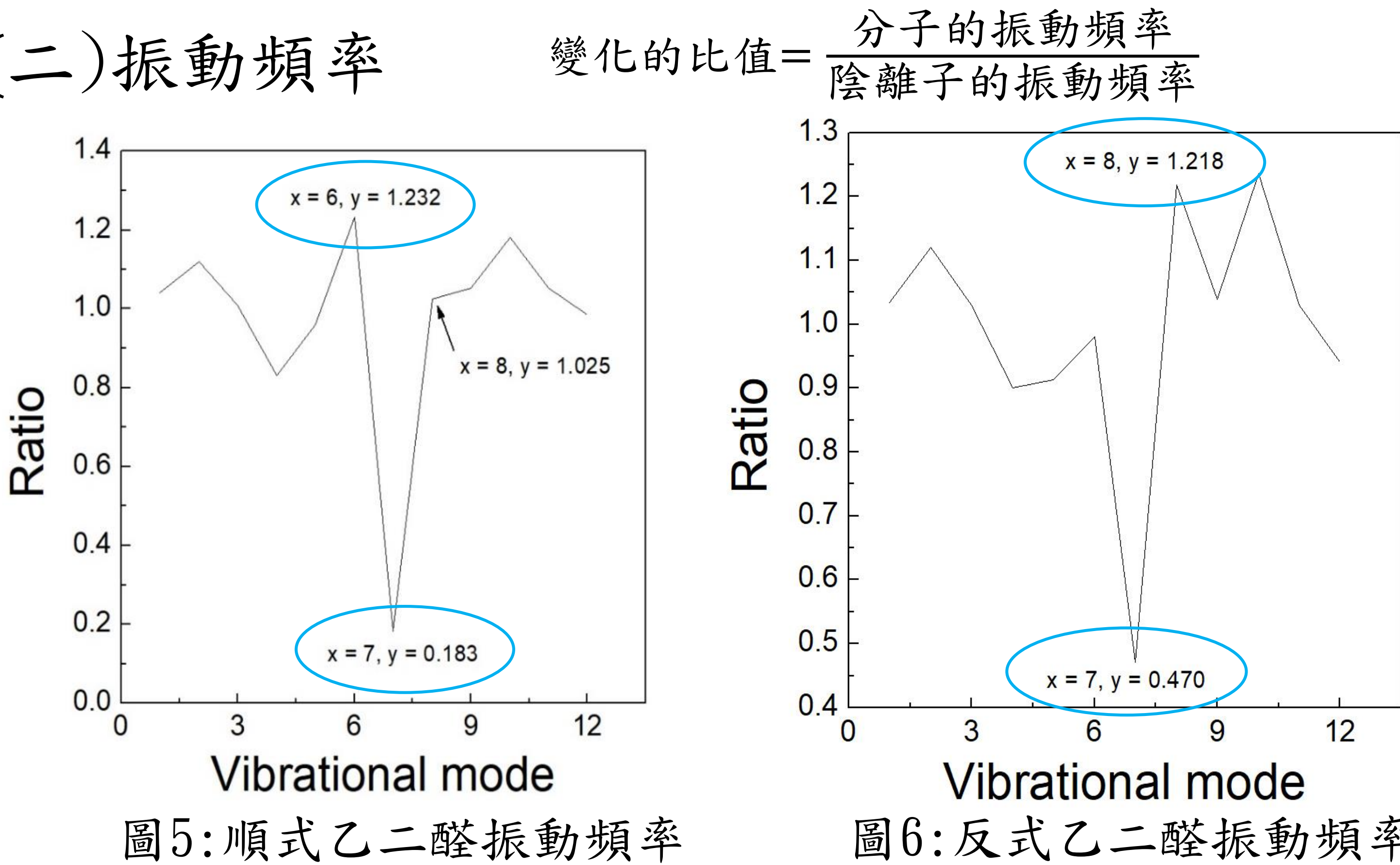
本研究以密度泛函理論的PBE1PBE、 ω B97XD、B3LYP方法，搭配aug-cc-pvtz基組，計算乙二醛分子與陰離子的平衡結構、振動頻率，並以本研究室開發的方法，計算乙二醛陰離子及順式乙二醛陰離子分別轉為分子的諧和及非諧和振子的法蘭克-康登因子，並模擬其光電子光譜與實驗光譜做比較。

實驗結果

(一)平衡結構



(二)振動頻率



	順式乙二醛		反式乙二醛	
	實驗值	理論計算值	實驗值	理論計算值
$\Delta R(C1, C3)$	10.00	10.21	9.60	9.62
$\Delta R(C1, O4)$	-5.50	-5.55	-6.00	-6.09
$A(H2, C1, O4)$	2.5	2.6	3.4	3.5
$A(C3, C1, O4)$	-6.0	-6.1	-3.9	-4.6

表1: 鍵長、鍵角與實驗值比較

(三)理論光譜及實驗光譜比較

(四)電子游離能計算

$$EI = \frac{E(M^+, CCSD(T) + ZPE^+}{M^+ \text{陽離子總能量}} - \frac{E(M, CCSD(T) - ZPE}{M \text{分子總能量}}$$

反式能量：

1.0250891124 eV (ω B97XD)

1.0249963215 eV (B3LYP)

(實驗值:-1.025)

順式能量：

1.144966249 eV (ω B97XD)

1.143441321 eV (B3LYP)

(實驗值:-1.143)

