引用信息： Xue Wei-Dong;Zhang Guang-Feng;Zhu Zheng-He;Wang Xiao-Lin;Luo De-Li;Zou Le-Xi;Sun Ying. Acta Phys. -Chim. Sin., 2001, 17(06): 501-506 [薛卫东;张广丰;朱正和;汪小琳;罗德礼;邹乐西;孙颖. 物理化学学报, 2001, 17(06): 501-506]



# $CO_2$二聚体分子弱结合作用的DFT计算

薛卫东;张广丰;朱正和;汪小琳;罗德礼;邹乐西;孙颖

四川大学原子与分子物理研究所,成都 610065；中国工程物理研究院,绵阳 621900;四川师范大学,成都 610066

摘要：

用密度泛函理论(DFT)的Becke 3LYP方法,在不同基集合（6 31G和6 311G系列）下对平行结构（C 2h）和T形结构(C2v)的CO2二聚体进行ab initio计算.通过计算,得到了CO2二聚体C2h和C2v两种构型的结构参数和离解能,并给出了CO2二聚体相对稳定构型C2h的12个正则振动分析图.结果表明,CO2二聚体的离解能为2 kJ•mol－1,CO2分子之间振动频率很小,从而说明CO2二聚体是弱结合分子.

关键词： $CO_2$二聚体 密度泛函理论 弱结合分子

收稿日期 2000-12-25 修回日期 2001-02-05 网络版发布日期 2001-06-15

通讯作者: 薛卫东 Email: xiesh@swufe.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能
本文信息
PDF(1483KB)
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
文章反馈
浏览反馈信息
本文关键词相关文章
$CO_2$二聚体
密度泛函理论
弱结合分子
本文作者相关文章
薛卫东
张广丰
朱正和
汪小琳
罗德礼
邹乐西
孙颖