

某些离解能、电子亲和能等的G2计算与评价

苏克和,Deakyné C A,Liebman J F

西北工业大学化工系, 西安 710072|Department of Chemistry,Eastern Illinois University,USA|Department of Chemistry,University of Maryland,USA

摘要:

关键词: 离解能 电子亲和能 电离能 评价 G2

收稿日期 1995-05-24 修回日期 1995-07-07 网络版发布日期 1995-10-15

通讯作者: 苏克和 Email:

本刊中的类似文章

1. 郭彩红;贾建峰;郭玲;武海顺.Ga_xP_y(x+y=8)及其阴离子团簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1253-1259
2. 陈向军;杨炳忻;庞文宁;陈森华;徐克尊.Ar原子电离能谱和Ar3p电子动量谱研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 190-192
3. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物SC_{2n}S²⁻(n=1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
4. 张军;赵卫民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1239-1244
5. 苏克和, Carol A.Deakyné, T.J.Tegeler.等电子-等自旋与非等旋反应的G2(MP2)和G2研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 292-296
6. 唐思清,李慎敏,杨志忠.离子簇合物N₂He_n(n=1,2,3)的*ab initio*研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 801-806
7. 苏克和;王育彬;文振翼.含芯电子相关能修正的G2理论——G2(fu)[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 856-864
8. 糜骏;冯文林;李会英;刘坤辉;蒲敏.H+CH₂CO反应机理的G2计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 483-487
9. 李旭东;侯廷军;徐俊杰.14种结合自由能评价函数的比较[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 504-507
10. 苏克和;文振翼;胡小玲;李秀仪;王育彬.NH⁰⁻¹⁺₂₋₃离解能等的高级*ab initio*计算与评价[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 385-390
11. 雷强华 陈长安 熊义富.Mg₂NiO₆(O=H, D, T)体系的热力学氢同位素效应[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 941-946
12. 渠双双;孙卫国;王宇杰;樊群超.卤素双原子分子部分电子态的完全振动能谱和离解能[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 13-18
13. 赵萌;王金兴;冯彩慧;邹博;陈聘;王竹仪;吴凤清;邹乐辉.TiO₂/Ag₂O纳米材料的制备及其对甲醛的气敏性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1003-1006
14. 曹晨忠;刘金玲.烷烃电离能和生成焓的相关性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 955-958
15. 陈向军;田善善;贾昌春;虞孝麒;杨炳忻;徐克尊.乙烷分子价壳层电离能谱和动量谱测量[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 490-492
16. 王芳;李桂琴;张毅;宁传刚;王岩;邓景康;郑延友.环戊烷分子的电子动量谱[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 673-675
17. 苏克和;魏俊;胡小玲;岳红;吕玲;王育彬;文振翼.几种含芯电子相关能修正的G2和G2(AC1)方法[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 972-980
18. 周卫东;盛六四;武国华;高辉;齐飞;张允武.溴乙烷光电离解离的理论计算和实验[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 948-951
19. 齐斌;苏克和;王育彬;文振翼;唐孝炎.Criegee中间体气相反应热力学的G2理论计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1033-1039
20. 曹晨忠;曾荣今.原子电负性和极化度对卤代甲烷C 1s电子电离能的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1085-1089