

研究论文

He₂F⁻体系的分子间相互作用势能面

孙晓颖, 王钦, 李志儒, 吴迪, 孙家锺, 唐敖庆

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

收稿日期 2006-4-26 修回日期 网络版发布日期 2007-4-23 接受日期

摘要 使用高水平的从头算CCSD(T)/aug-cc-pVTZ方法, 经过Counterpoise校正, 计算了He₂F⁻体系的分子间相互作用势能面. 在He₂F⁻体系的相互作用势能面的最小值处, 发现了一个等腰三角形的稳定结构. 在这个结构中, He...F⁻距离是 0.334 nm, He...He 的距离是 0.295 nm, ∠HeF⁻He 为 52.5°. 计算了此稳定结构的频率、相互作用能、二体相互作用能和三体相互作用能. 在CCSD(T)/d-aug-cc-pVTZ水平下, 相互作用能为-1.727 kJ/mol.

关键词 [相互作用势能面](#) [从头算方法](#) [三体相互作用能](#) [He₂F⁻](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

李志儒 lzr@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页: 孙晓颖; 王钦; 李志儒; 吴迪; 孙家锺; 唐敖庆

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(255KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“相互作用势能面”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [孙晓颖, 王钦, 李志儒, 吴迪, 孙家锺, 唐敖庆](#)