

## 研究论文

### 硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较

谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山

南京理工大学化学系,南京 210094;中国工程物理研究院,绵阳 621900

#### 摘要:

用密度泛函理论(DFT)和从头算(*ab initio*)方法,分别在B3LYP/6-31G和HF/6-31G水平上求得硝酸甲酯三种二聚体的全优化几何构型和电子结构,并用6-311G和6-311++G基组进行总能量计算.对HF/6-31G计算结果进行MP4SDTQ电子相关校正.在各基组下均进行基组叠加误差(BSSE)和零点能(ZPE)校正求得结合能.对6-31G优化构型作振动分析并基于统计热力学求得200~600 K温度下单体和二聚体的热力学性质.详细比较两种方法的相应计算结果,发现DFT求得的分子间距离较短,分子内键长较长,所得结合能均小于相应*ab initio*计算值.

关键词: 硝酸甲酯二聚体 分子间相互作用 密度泛函理论(DFT) 从头算(*ab initio*) 热力学性质

收稿日期 2001-09-24 修回日期 2001-11-19 网络版发布日期 2002-04-15

通讯作者: 肖鹤鸣 Email: xiao@mail.njust.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1441KB)

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

▶ 硝酸甲酯二聚体

▶ 分子间相互作用

▶ 密度泛函理论(DFT)

▶ 从头算(*ab initio*)

▶ 热力学性质

本文作者相关文章

▶ 谭金芝

▶ 肖鹤鸣

▶ 贡雪东

▶ 李金山