

TATB与二氟甲烷以及与聚偏二氟乙烯的分子间相互作用

李金山,肖鹤鸣,董海山

南京理工大学化学系·南京(210014);中国工程物理研究院流体物理研究所;中国工程物理研究院冲击波物理与爆轰物理实验室;中国工程物理研究院化工材料研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用密度泛函理论(SFT)B3LYP方法,取3-21G*基组,求得TATB(1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯)与CH₂F₂混合体系的三种优化构型以Boys-Bernardi方案校正基组叠加误差求得结合能。在B3LYP/6-311G**/B3LYP/3-21G*水TATB与CH₂F₂间的最大结合能为4.62kJ·mol⁻¹,还用MO-PM3

方法计算TATB与—(CF₂CH₂)_n(N=1,2,3,4,5)的混合体系,

由色散校正电子相关近似地求得结合能力。当n=5时,求得TATB与—(CF₂CH₂)_n的最大结合能约为52.97kJ·mol⁻¹。此外,自然键轨道分析用于讨论TATB与CH₂F₂之间的电荷转移。

关键词 [密度泛函理论](#) [硝基苯P](#) [二氟甲烷](#) [聚偏二氟乙烯](#) [相互作用](#) [电荷转移](#)

分类号 [064](#)

Intermolecular interactions of TATB with difluoromethane and polyvinylidene fluoride

Li Jinshan, Xiao Heming, Dong Haishan

Nanjing Univ Sci & Technol, Dept Chem, Nanjing(210014)

Abstract Tree optimized geometries of the mixed system of TATB (1,2,3,5,- triamino -2,4,6-trinitrobenzene) +CH₂F₂ are gained using the density functional theory (DFT) at B3LYP/3-21G* level. The binding energy, which is corrected for the basis set superspersion error by the Boys =Bernardi method, is given. At B3LYP/6-311G**/B3LYP/3-21G*level, the greatest binding energy of TATB and CH₂F₂ is 4.62kJ·mol⁻¹. In addition, the MO-PM3 method is employed to investigate the intermolecular interactions between TATB and —(CF₂CH₂)_n (N=1, 2,3,4,5),(the end atoms are H). The binding energies of TATB and —(CF₂CH₂)_n are obtained with the approximation of electronic correlation correction by the dispersion energy. The greatest binding energy between —(CF₂CH₂)_n (n=5) and TATB is 52.97kJ·mol⁻¹. The natural bond orbital analysis is used to discuss the charge transfer between TATB and CH₂F₂.

Key words [NITROBENZENE P](#) [DIFLUOROMETHANE](#) [INTERACTIONS](#) [CHARGE TRANSFER](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“密度泛函理论”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [李金山](#)

· [肖鹤鸣](#)

· [董海山](#)