化学学报 2002 60 (2): 200-206 ISSN: 0567-7351 CN: 31-1320/06

硝酸乙酯分子间相互作用的**ab initio**研究

谭金芝,肖鹤鸣,贡雪东,李金山

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

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在abinitio-HF/6-31G水平上求得硝酸乙酯二聚体势能面上的四种优化构型和电子结构。经MP2电子相关校正和基组叠加误差(BSSE)以及零点能(ZPE)校正，求得二聚体的最大结合能为11.46kJ.mol^-^1，还进行HF/6-311G和HF/6-311++G水平的总能量比较计算，发现6-31G基组对计算结合能比较适合，二子体系间的电荷转移很少，对优化构型进行振动分析，并基于统计热力学求得从单体形成二聚体的热力学性质变化。

关键词 硝酸乙酯 从头计算法 炸药 热力学性质 分子间力 硝酸酯类炸药 相互作用 异构体 电子结构

分类号 0641 TQ56

Ab initio study on the intermolecular interaction of ethyl nitrate

Tan Jinzhi,Xiao Heming,Gong Xuedong,Li Jinshan

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

Abstract The geometries and electronic structures of ethyl nitrate and its dimers have been calculated by using the ab initio method at the HF/6- 31G level for the first time. The total energies have been calculated using 6-311G and 6-311++G basis sets. All the binding energies have been corrected by the basis set superpositio error(BSSE) and zero point energy (ZPE). The greatest corrected dimer bindign energy at the HF/6-31G level is 11.46 kJ.mol^-^1. Charge transfer between two subsystems is small. Based on the vibrational analysis, the changes of thermodynamic properties from mono to dimer have been calculated using the statistical thermodynamic method.

Key words ETHYL NITRATE AB INITIO CALCULATION EXPLOSIVES THERMODYNAMIC PROPERTIES INTERMOLECULAR FORCES NITRIC- ESTER-COMPOUND EXPLOSIVES INTERACTIONS ISOMER ELECTRONIC STRUCTURE

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(0KB)

[HTML全文](0KB)

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“硝酸乙酯”的相关文章

本文作者相关文章

- 谭金芝
- 肖鹤鸣
- 贡雪东
- 李金山