

研究论文

COCl₂...NH₃和COCl₂...H₂S体系的理论研究

吴功兵, 于健康, 吴迪, 孙家锺

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 2005-11-19 修回日期 网络版发布日期 2006-11-8 接受日期

摘要 在MP2水平上, 用aug-cc-pVTZ基组对COCl₂...NH₃和COCl₂...H₂S体系进行几何优化和频率计算, 同时使用Counterpoise技术进行BSSE校正, 分别得到4个COCl₂...NH₃和2个COCl₂...H₂S无虚频的稳定结构: N(S)...C连接的构型(I, II, V)和N(S)...Cl—C直线型连接的构型(III, IV, VI). 第一类构型比第二类构型相互作用能更大、更稳定. 在得到的6个稳定络合物中, 络合物 I 是最稳定的.

关键词 [从头计算](#) [络合物](#) [弱相互作用](#) [BSSE](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

吴迪 wud@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页: 吴功兵; 于健康; 吴迪; 孙家锺

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(289KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“从头计算”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [吴功兵, 于健康, 吴迪, 孙家锺](#)