

引用信息: Su Ke-He; Wei Jun; Hu Xiao-Ling; Yue Hong; Lv Ling; Wang Yu-Bin; Wen Zhen-Yi. Acta Phys. -Chim. Sin., 2000, 16(11): 972-980 [苏克和; 魏俊; 胡小玲; 岳红; 吕玲; 王育彬; 文振翼. 物理化学学报, 2000, 16(11): 972-980]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

几种含芯电子相关能修正的G2和G2(ACI)方法

苏克和; 魏俊; 胡小玲; 岳红; 吕玲; 王育彬; 文振翼

西北工业大学化工系 西安 710072; 西北大学现代物理所 西安 710068

摘要:

针对冻结芯电子近似, 在MP2/6-311G(d,p)级别上对G2、MP2/6-311G(d)和MP2/6-311G(d,p)级别上对G2(QCI)方法进一步考虑了芯电子相关能修正, 尝试建立了G2(fu2)、G2(QCI/fu1)和G2(QCI/fu2)方法。G2-I test set 的反应能量计算结果表明, 这些方法进一步减小了经验修正量; G2(QCI/fu1)和G2(QCI/fu2)也比G2(QCI)的总体精度有所提高; 但G2(fu2)在G2基础上, 总体精度没有改善。G2(fu2)、G2(QCI/fu1)和G2(QCI/fu2)计算G2-I test set反应能量的平均绝对偏差分别为5.11、4.74和4.81kJ mol⁻¹, G2和G2(QCI)分别为5.09和4.97kJ mol⁻¹。

关键词: G2理论 G2(QCI)理论 芯电子相关能 G2(fu2) G2(QCI/fu1) G2(QCI/fu2)

收稿日期 2000-02-21 修回日期 2000-04-13 网络版发布日期 2000-11-15

通讯作者: 苏克和 Email: sukehe@nwpu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 苏克和, Carol A.Deakyne, T.J.Tegeler. 等电子-等自旋与非等旋反应的G2(MP2)和G2研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 292-296
2. 苏克和; 王育彬; 文振翼. 含芯电子相关能修正的G2理论——G2(fu1)[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 856-864
3. 糜骏; 冯文林; 李会英; 刘坤辉; 蒲敏. H+CH₂CO反应机理的G2计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 483-487

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1471KB)

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

▶ G2理论

▶ G2(QCI)理论

▶ 芯电子相关能

▶ G2(fu2)

▶ G2(QCI/fu1)

▶ G2(QCI/fu2)

本文作者相关文章

▶ 苏克和

▶ 魏俊

▶ 胡小玲

▶ 岳红

▶ 吕玲

▶ 王育彬

▶ 文振翼