

1, 3-二氟丙烷构象和电子结构的从头算和 密度泛函理论计算

吴德印,任译,刘玉明,田安民,H.Sun

四川大学化学系,成都(610064);美国加利福尼亚圣地亚哥MSI科技学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用从头算和密度泛函理论研究了1,3-

二氟丙烷的构象和电子结构。在计算的各种理论水平下,GG构象是最稳定构象,AG构象次之。利用分子力场的非键作用量化旁式效应,由MM2力场的非键参数计算的结果较为合理。对于GG和AG构象,在HF/6-31G^{*}和HF/6-31+G^{**}水平预测的构象分布与实验值接近。

关键词 密度函数 从头算法 电子结构 构象 丙烷P 二氟甲烷P 理论计算 旁式效应

国家教委高等学校博士学科点专项科研基金

分类号 0641

Ab initio and density functional theoretical calculations on conformations and electronic structures of 1, 3-difluoropropane

Wu Deyin, Ren Yi, Liu Yuming, Tian Anmin, H. Sun

Sichuan Univ., Dept Chem. Chengdu(610064)

Abstract The conformations and electronic structures of 1, 3-difluoropropane have been investigated by ab initio and density functional methods. The GG conformer is the most stable, and the AG conformer is the second. The gauche effect is evaluated from electrostatic interaction. The energies by the van der Waals' parameters of MM2 force field seem to be reasonable. The populations of conformations at HF/6-31G^{*} and HF/6-31+G^{**} levels are accorded with the experimental results for GG and AG conformers.

Key words [AB INITIO CALCULATION](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [CONFORMATION](#) [PROPANE P](#) [DIFLUOROMETHANE P](#) [THEORETICAL CALCULATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(555KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“密度函数”的](#)

[相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [吴德印](#)
- [任译](#)
- [刘玉明](#)
- [田安民](#)
- [HSun](#)