



کارآیی روش‌های نظریه تابع چگال در محاسبه خواص مولکولی استون

سید فرامرز طیاری^{۱*}، منصوره زاهدی تبریزی^۲، حسین عزیزی توپکانلو^۳، فرناز نقوی^۴

^۱ دانشگاه آزاد اسلامی، واحد نیشابور، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، نیشابور، ایران

^۲ دانشگاه الزهراء، گروه شیمی

^۳ دانشگاه فردوسی مشهد، گروه شیمی

^۴ دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شاهرود، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، شاهرود، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۸۹/۱۰/۱۸، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۸۹/۱۱/۲۳، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۸۹/۱۲/۷

چکیده

با استفاده از نظریه تابعی چگال فرکانسهای ارتعاشی، شدت نوارهای ارتعاشی مادون قرمز (IR) و پارامترهای ساختاری مولکول استن با استفاده از نظریه تابعی چگال (DFT) محاسبه و کارآیی نسبی سطوح مختلف این نظریه برای محاسبه خواص مذکور مورد ارزیابی قرار گرفت. سطوح به کار برده شده در این پژوهش عبارتند از: B3LYP، B972، BLYP، G96LYP، BP86، B3P86، SVWN5 و B3PW91 با توابع پایه 6-31G*، 6-31G**، 6-311G**، 6-311++G**، 6-31++G**، D95**، D95++**، cc-PVTZ و cc-PVDZ. از سطوح MP2، HF و MP3 نیز برای مقایسه استفاده گردید. داده‌های محاسباتی با مقادیر تجربی مقایسه شدند.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگال، فرکانس‌های ارتعاشی، شدت‌های نوارهای مادون قرمز، پارامترهای ساختاری، همان دوقطبی.

۱. مقدمه

مولکولی، فرکانسهای ارتعاشی و شدت نوارهای رامان و مادون قرمز مورد استفاده قرار گرفته است. دانستن کارآیی و دقت این روشها در پیش‌بینی خواص مولکولی می‌تواند برای شیمیدانان تجربی و نظری بسیار سودمند باشد. دانش ما درباره کارآیی این روشها در پیش‌بینی خواص مولکولی می‌تواند به ما در گزینش

نظریه تابعی چگال (DFT) یک روش جدید در محاسبات شیمی کوانتومی محسوب می‌شود که براساس نظریه کوهن-شام بنا شده است. در دهه گذشته، محاسبات DFT به صورت ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی خواص مولکولی مختلفی از جمله، ساختار

*عهده دار مکاتبات: سید فرامرز طیاری

نشانی: نیشابور - دانشگاه آزاد اسلامی - دانشکده علوم - گروه شیمی

تلفن: ۰۹۱۵۳۱۰۳۵۳۸ پست الکترونیک: E-Mail: sftayyari@hotmail.com

۲. روش محاسباتی

تمام پارامترهای بهینه شده استون، بسامدهای ارتعاشی، و شدت‌نوارهای زیر قرمز مربوطه با استفاده از نرم‌افزار گوسین ۰۳ محاسبه شدند [۱۵]. روشهای نظریه تابعی چگالی مورد استفاده عبارتند از توابع تغییر [B3[17], B[16], PW91[19], LYP[20], P86[21] و G96[18] که با توابع همبستگی غیر موضعی [PW91[19], LYP[20], P86[21] و P86[21] پیوند یافته اند. در نتیجه توابع B3LYP, BLYP, G96LYP, BP86, B3P86, B3PW91 و B972[22-23] به کار برده شدند. از توابع همبستگی موضعی VWN و توابع تغییر اسلیتر برای محاسبات DFT نیز استفاده شده است. با این روشها توابع پایه زیر به کار برده شد.

الف) مجموعه های پایه شکاف ظرفیت شامل توابع قطبیده و نفوذی مانند:

6-31G, 6-31G*, 6-31G**, 6-31++G**, 6-311G**, 6-311+G**, 6-311++G**

ب) توابع پایه دوتائی-زتا با توابع قطبیده D95** و همچنین با توابع نفوذی D95++**

پ) توابع همبستگی دوتائی و سه تائی Dunning cc-pVDZ و cc-pVTZ

پارامترهای رگرسیونی (R^2) ، انحراف استاندارد و ضریب رگرسیون) با استفاده از نرم‌افزار اکسل محاسبه شدند.

۳. نتایج و بحث

۳-۱-۱. بسامدهای ارتعاشی

محاسبات کامل مربوط به اعداد موج ارتعاشی و شدتها به دست آمده در این پژوهش در اختیار نویسنده است. پارامترهای رگرسیونی فرکانسهای ارتعاشی تجربی در برابر بسامدهای نظری با استفاده از دو معادله زیر محاسبه شده اند:

$$V_{obs} = \alpha V_{Theo} \quad (1)$$

$$V_{obs} = \alpha V_{Theo} + \beta \quad (2)$$

بهترین روش با صرفه‌جویی در وقت و هزینه برای مطالعه مولکولهای ناشناخته کمک کند. در حال حاضر محاسبات DFT در توصیف شکافهای نواری (Band-gap) و برهمکنشهای واندروالسی با شکست مواجه است [۱]. همچنین توابع تقریبی برای محاسبات ترموشیمی قابل اعتماد نیستند [۲]. شدت نوارهای IR یکی از مهمترین کمیتها در شیمی است که برای ارزیابی اسیدیتته اتمهای هیدروژن در هیدروکربن و همچنین برای شناسایی مقادیر بسیار کم ترکیبات در اتمسفر یا فرایندهای احتراق، بسیار مفید است [۳]. تاکنون برای چندین مولکول شدت‌های تجربی مادون قرمز در فاز گاز و محلول گزارش شده اند [۳-۷]. ولی تعیین این داده‌ها از روی طیفهای تجربی IR کار مشکلی است و در نتیجه روشهای نظری برای محاسبه شدتها بسیار مفیدند. به علاوه، محاسبه شدت نوارهای IR توسط روشهای MP2 و HF برای مولکولهای مختلف گزارش شده است [۸]. در این کار ما شدتهای IR محاسباتی و موقعیت نوارهای ارتعاشی و همچنین داده‌های ساختاری استون را به دست آوردیم. دلیل گزینش استون حجم زیاد پژوهشهای تجربی در باره بسامدهای ارتعاشی [۹-۱۱]، شدت نوارهای IR [۵] و داده‌های ساختاری آن است. کاسی و همکاران [۱۱] با استفاده از تجزیه و تحلیل مختصات طبیعی انتساب بسامدهای ارتعاشی IR و رامان را در ناحیه $300-4000 \text{ cm}^{-1}$ انجام دادند. این پژوهشگران نتوانستند شیوه های ارتعاشی A_2 مربوط به پیچش گروههای CH_3 را مشاهده کنند. فلیس و همکاران [۱۲] با استفاده از تکنیک یونش چند فوتونی تشدید دوفوتونی فرابنفش، بسامد ν_{12} (شیوه A_2 مربوط به پیچش گروه CH_3) را برابر $77 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ به دست آوردند. اسمیرز و همکاران [۱۳] هر دو تا شیوه ارتعاشی گروه CH_3 ، ν_{17} و ν_{12} را با دقت بیشتر به ترتیب در 77 و 125 cm^{-1} به دست آوردند. به هر حال، محاسبات DFT و ab initio اندکی بر روی فرکانسهای ارتعاشی و ساختاری استون تا حالا گزارش شده است [۱۴].

هدف از این کار، توصیف کارآیی و دقت روشهای DFT در پیش‌بینی خواص ساختاری، بسامدهای ارتعاشی، و شدت نوارهای ارتعاشی استون است.

انحراف معیاری که برای روشهای HF، MP2 و MP3 به دست آمد در مقایسه با مقادیر به دست آمده برای روش های DFT بسیار بزرگتر است.

۳-۱-۲ شدت نوارهای ارتعاشی زیر قرمز

شدتهای نوارهای ارتعاشی زیر قرمز محاسبه شده و تجربی استون در (جدول-۲) آورده شده اند (شدت نوارهای زیر قرمز تجربی از مرجع-۵ استخراج شده اند). تجزیه و تحلیل رگرسیون شدتهای نوارهای زیر قرمز با استفاده از معادله زیر انجام شد:

$$I_{obs} = \alpha I_{theo} \quad (3)$$

که در آن I_{obs} و I_{theo} به ترتیب شدت نوارهای زیر قرمز مشاهده شده و نظری اند. R^2 ، ضریب میزان پذیرداری (α) و انحراف معیار (SD) در جدول ۲ فهرست شده اند. (جدول-۲) نشان می دهد که سطوح محاسباتی تأثیر زیادی بر شدتهای محاسبه شده دارند. بر اساس این محاسبات شدتهای محاسباتی به دست آمده با استفاده از روشهای DFT، ۴۰-۲۰ درصد بالاتر از مقادیر تجربی معادل است. همان طور که در این جدول نشان داده شده اندازه شدتهای مادون قرمز محاسباتی به توابع پایه و سطوح محاسباتی بسیار وابسته است. روند تغییر R^2 با توجه به توابع پایه استفاده شده در سطح B3LYP به صورت زیر است:

6-31G**>6-311G**>cc-pVDZ>6-31G*>cc-pVTZ> 6-31++G**>6-311++G**>6-311+G**>6-31G>D95**>D95+**

(جدول-۲) نشان می دهد که تفاوت مشخص و روشنی بین نتایج به دست آمده از BLYP و B3LYP است. تغییرات R^2 در سطح BLYP به صورت زیر است:

6-31++G**>6-311++G**>6-311+G**>cc-pVDZ**>cc-pVTZ>D95+**>6-311G**>D95**>6-31G**>6-31G*>6-31G

این ترتیب نشان می دهد که شدتهای مادون قرمز محاسباتی در تابع پایه 6-31++G** و با سطح BLYP در توافق بسیار خوبی با مقادیر تجربی است. برای سطح G96LYP، با استفاده از تابع پایه 6-31++G** بهترین نتیجه به دست آمد که توافق خوبی با مقادیر تجربی داشت. روند تغییر R^2 برای این سطح را می توان به صورت زیر نشان داد:

6-31++G**>6-311+G**>6-311++G**>cc-pVDZ>cc-pVTZ>D95+**>6-311G**>D95**>6-31G**>6-31G*>6-31G

که در آن V_{obs} و V_{theo} به ترتیب بسامدهای هماهنگ محاسبه شده و تجربی در بعد cm^{-1} اند (داده های تجربی از مرجع ۲۴ استخراج شده اند به جز اعداد موج ۸۷۲، ۱۲۵ و $77 cm^{-1}$ که به ترتیب بر گرفته از مراجع ۱۴ و ۱۳ هستند). داده های تجربی استفاده شده در این پژوهش در حالت گازی هستند. ضریب مقیاس گذاری (α)، ضریب رگرسیون (R^2) و انحراف معیار (SD) در (جدول-۱) فهرست شده اند. براساس این جدول، نتایج خیلی خوبی با استفاده از سطح محاسباتی B3LYP/6-31G* با $SD = 15 cm^{-1}$ برای کل نواحی بسامدها به دست آمد. در مورد سطوح B972 و BLYP بهترین نتایج برای SD کوچکتر (یا R^2 بزرگتر) با استفاده از تابع پایه 6-31G** به دست آمد.

همچنین (جدول-۱) نشان میدهد که تابع پایه 6-31G** در سطوح G96LYP و BP86 بهترین توافق با مقادیر تجربی را دارد. نتایج به دست آمده با استفاده از سطح B3P86 بسیار شبیه نتایج به دست آمده از سطح BP86 است. همچنین از جدول ۱ نتیجه می شود که محاسبات با استفاده از سطوح B3PW91 و SVWN5 با به کار گیری توابع پایه 6-31G* و 6-31G* بهترین مقدار را برای R^2 در مقایسه با سایر توابع پایه را می دهد. برای بررسی مفید بودن ضرایب میزان پذیرداری به صورت جدا برای دو ناحیه زیر ۲۰۰۰ و بالای $2000 cm^{-1}$ توافق بین فرکانسهای نظری محاسبه شده و تجربی مورد ارزیابی قرار گرفت. این نتایج در جدول یک نشان داده شده اند. در روش اول تجزیه و تحلیل رگرسیونی، عرض از مبدأ صفر در نظر گرفته شد (معادله-۱). در این روش مقایسه بین بسامدهای هماهنگ نظری محاسبه شده و تجربی برای به دست آوردن پارامترهای رگرسیونی انجام شد. در روش دوم عرض از مبدأ (β) نیز به معادله اضافه شد و محاسبات تکرار شد. این نتایج نیز در (جدول-۱) نشان داده شده اند. این جدول نشان میدهد که نتایج به دست آمده با استفاده از روش دوم انحراف معیار بهتری نسبت به نتایج به دست آمده با استفاده از روش اول است. مقادیر ضرایب مقیاس گذاری ۰/۹۷۰-۰/۹۵۸ برای سطح B3LYP با به کار گیری توابع پایه مختلف با استفاده از روش ۱ برای کل نواحی بسامدها به دست آمد. همان طور که در جدول یک نشان داده شده است،

جدول ۱- ضریب رگرسیون، فاکتور میزان پذیری و انحراف استاندارد محاسباتی استون^۳.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm ⁻¹ بالایی						۲۰۰۰cm ⁻¹ پایینی									
	روش ۱			روش ۲			روش ۱			روش ۲						
	R ²	SD	α	R ²	SD	α	R ²	SD	α	R ²	SD	α				
B3LYP																
A	۰/۹۹۷۹۸	۲۲	۰/۹۶۰	۰/۹۹۷۹۹	۲۳	۵	۰/۹۵۶	۰/۹۱۴۲۹	۱۲	۰/۹۵۷	۰/۹۹۶۴۰	۳	۶۶۳	۰/۹۹۹۵۷	۲۰	۰/۹۵۸
B	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۰/۹۶۶	۰/۹۹۹۵۴	۱۱	۲۲	۰/۹۴۸	۰/۹۴۸۳۲	۱۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۵۳۷	۳	۵۳۱	۰/۹۹۹۷۵	۱۵	۰/۹۶۰
C	۰/۹۹۹۰۲	۱۶	۰/۹۷۴	۰/۹۹۹۴۲	۱۲	۲۲	۰/۹۵۷	۰/۹۴۵۸۸	۱۱	۰/۹۵۸	۰/۹۹۶۶۹	۳	۵۸۹	۰/۹۹۹۵۹	۲۰	۰/۹۶۲
D	۰/۹۹۹۲۴	۱۴	۰/۹۸۱	۰/۹۹۹۴۸	۱۲	۱۷	۰/۹۶۸	۰/۹۶۸۵۹	۷	۰/۹۶۴	۰/۹۹۵۴۵	۳	۴۱۹	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۶۹
E	۰/۹۹۹۶۳	۱۰	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۷۸	۸	۱۳	۰/۹۷۲	۰/۹۷۱۵۰	۷	۰/۹۶۴	۰/۹۹۵۲۴	۳	۳۹۸	۰/۹۹۹۶۷	۱۸	۰/۹۶۹
F	۰/۹۹۹۶۴	۹	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۷۸	۸	۱۳	۰/۹۷۲	۰/۹۷۱۵۰	۷	۰/۹۶۴	۰/۹۹۵۲۴	۳	۳۹۸	۰/۹۹۹۶۸	۱۸	۰/۹۶۹
G	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۰/۹۷۹	۰/۹۹۹۶۴	۱۰	۲۴	۰/۹۶۰	۰/۹۴۶۶۱	۱۰	۰/۹۵۹	۰/۹۹۶۵۳	۳	۵۴۴	۰/۹۹۹۵۲	۲۱	۰/۹۶۵
H	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۴۶	۱۲	۱۲	۰/۹۷۳	۰/۹۲۱۱۷	۱۲	۰/۹۵۶	۰/۹۹۴۸۸	۳	۶۳۶	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۳
I	۰/۹۹۹۵۶	۱۰	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۷۱	۹	۱۳	۰/۹۷۴	۰/۹۲۷۵۹	۱۱	۰/۹۵۸	۰/۹۹۴۸۵	۳	۶۱۴	۰/۹۹۹۳۸	۲۴	۰/۹۶۵
J	۰/۹۹۸۳۲	۲۰	۰/۹۹۳	۰/۹۹۸۵۱	۲۰	۱۵	۰/۹۸۱	۰/۹۲۹۹۵	۱۱	۰/۹۶۱	۰/۹۹۶۰۸	۳	۶۰۹	۰/۹۹۸۹۴	۳۲	۰/۹۷۰
K	۰/۹۹۹۲۶	۱۴	۰/۹۸۱	۰/۹۹۹۵۷	۱۱	۱۹	۰/۹۶۶	۰/۹۷۷۰۸	۶	۰/۹۶۴	۰/۹۹۴۹۴	۳	۳۵۱	۰/۹۹۹۶۴	۱۸	۰/۹۶۹
B972																
A	۰/۹۹۸۲۲	۲۱	۰/۹۳۵	۰/۹۹۸۴۱	۲۱	۱۱	۰/۹۴۵	۰/۸۴۴۶۱	۱۷	۰/۹۶۶	۰/۹۹۳۱۳	۴	۸۳۱	۰/۹۹۹۵۵	۲۱	۰/۹۸۴
B	۰/۹۹۸۶۸	۱۸	۰/۹۶۱	۰/۹۹۹۳۹	۱۳	۲۹	۰/۹۲۹	۰/۹۰۶۸۵	۱۳	۰/۹۶۷	۰/۹۹۵۸۸	۳	۶۸۵	۰/۹۹۹۵۴	۲۱	۰/۹۵۱
C	۰/۹۹۸۵۳	۱۹	۰/۹۷۰	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۲۶	۰/۹۴۹	۰/۸۸۴۸۴	۱۴	۰/۹۶۷	۰/۹۹۲۵۸	۴	۷۳۷	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۳
D	۰/۹۹۸۷۲	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۲۲	۰/۹۵۹	۰/۹۲۵۵۲	۱۱	۰/۹۵۳	۰/۹۹۳۸۰	۴	۶۰۳	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۹
E	۰/۹۹۹۳۹	۱۲	۰/۹۷۸	۰/۹۹۹۶۱	۱۰	۱۶	۰/۹۶۵	۰/۹۲۷۴۱	۱۱	۰/۹۵۳	۰/۹۹۴۳۳	۴	۶۱۲	۰/۹۹۹۳۸	۲۴	۰/۹۶۰
F	۰/۹۹۹۳۰	۱۳	۰/۹۷۸	۰/۹۹۹۵۸	۱۱	۱۸	۰/۹۶۴	۰/۹۲۹۷۳	۱۱	۰/۹۵۳	۰/۹۹۴۰۲	۴	۶۰۳	۰/۹۹۹۳۶	۲۵	۰/۹۶۰
G	۰/۹۹۹۱۵	۱۴	۰/۹۷۴	۰/۹۹۹۵۶	۱۱	۲۲	۰/۹۵۷	۰/۸۸۸۱۸	۱۴	۰/۹۴۸	۰/۹۹۳۲۰	۴	۷۳۰	۰/۹۹۹۲۷	۲۶	۰/۹۵۵
H	۰/۹۹۹۰۳	۱۵	۰/۹۷۶	۰/۹۹۹۲۴	۱۴	۱۶	۰/۹۶۳	۰/۸۵۱۸۵	۱۶	۰/۹۴۴	۰/۹۸۴۷۸	۶	۷۹۸	۰/۹۹۸۹۷	۳۱	۰/۹۵۳
I	۰/۹۹۹۲۱	۱۴	۰/۹۷۸	۰/۹۹۹۴۳	۱۲	۱۶	۰/۹۶۵	۰/۸۵۶۰۹	۱۶	۰/۹۴۵	۰/۹۸۵۵۹	۶	۷۹۱	۰/۹۹۹۰۲	۳۱	۰/۹۵۴
J	۰/۹۹۷۶۴	۲۴	۰/۹۸۶	۰/۹۹۷۹۴	۲۳	۱۹	۰/۹۷۱	۰/۸۵۰۲۶	۱۶	۰/۹۴۸	۰/۹۸۷۹۵	۳	۸۰۸	۰/۹۹۸۴۴	۳۹	۰/۹۵۹
K	۰/۹۹۸۸۶	۱۷	۰/۹۷۸	۰/۹۹۹۲۵	۱۴	۲۱	۰/۹۶۱	۰/۹۴۵۳۳	۱۰	۰/۹۵۴	۰/۹۹۵۱۱	۳	۵۴۳	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۱
BLYP																
A	۰/۹۹۶۵۰	۲۹	۰/۹۹۰	۰/۹۹۶۵۴	۳۰	۷	۰/۹۸۷	۰/۸۰۴۸۱	۱۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۴۸۱	۳	۷۳۷	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۸۵
B	۰/۹۹۸۹۲	۱۶	۱/۰۰۶	۰/۹۹۹۲۵	۱۳	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۴۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۴۷۸	۴	۶۱۸	۰/۹۹۹۳۹	۲۴	۰/۹۹۰
C	۰/۹۹۸۹۵	۱۶	۱/۰۰۶	۰/۹۹۹۲۵	۱۳	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۴۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۴۷۸	۴	۶۱۸	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۰
D	۰/۹۹۸۶۱	۱۹	۱/۰۱۴	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۲۵	۰/۹۹۳	۰/۹۶۴۴۲	۸	۰/۹۸۹	۰/۹۹۲۰۲	۴	۴۲۵	۰/۹۹۹۳۰	۲۶	۰/۹۹۶

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm ⁻¹ پایین										۲۰۰۰cm ⁻¹ بالای										کل فرکانسها								
	روش ۱					روش ۲					روش ۱					روش ۲					روش ۱								
	R ²	SD	α	R ²	S	D	β	α	R ²	SD	α	R ²	SD	β	α	R ²	SD	β	α	R ²	SD	β	α	R ²	SD	β	α		
E	.۹۹۹۱۴	۱۵	۱/۰۱۵	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۸	۱/۰۰۰	.۹۹۹۳۷	۸	.۹۸۹	.۹۹۲۲۴	۴	۴۱۳	.۸۵۲	.۹۹۹۳۶	۲۵	.۹۹۹			.۹۹۹۳۶	۲۵	.۹۹۹			.۹۹۹۳۶	۲۵	.۹۹۹		
F	.۹۹۹۲۷	۱۳	۱/۰۱۵	.۹۹۹۴۸	۱۲	۱۶	۱/۰۰۲	.۹۹۹۶۷	۸	.۹۸۹	.۹۹۱۰۳	۴	۴۱۷	.۸۵۱	.۹۹۹۳۹	۲۴	.۹۹۹			.۹۹۹۳۹	۲۴	.۹۹۹			.۹۹۹۳۹	۲۴	.۹۹۹		
G	.۹۹۹۱۵	۱۴	۱/۰۱۳	.۹۹۹۴۹	۱۲	۲۰	.۹۹۷	.۹۹۳۷۵	۱۱	.۹۸۵	.۹۹۴۱۶	۴	۵۱۳	.۸۹۵	.۹۹۹۷۸	۲۶	.۹۹۹			.۹۹۹۷۸	۲۶	.۹۹۹			.۹۹۹۷۸	۲۶	.۹۹۹		
H	.۹۹۹۳۳	۱۳	۱/۰۱۷	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۱	۱/۰۰۸	.۹۹۱۹۶	۱۲	.۹۸۱	.۹۹۶۶۰	۳	۶۶۶	.۸۶۸	.۹۹۸۹۸	۳۱	.۹۹۹			.۹۹۸۹۸	۳۱	.۹۹۹			.۹۹۸۹۸	۳۱	.۹۹۹		
I	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱/۰۱۹	.۹۹۹۶۱	۱۰	۱۱	۱/۰۱۰	.۹۹۱۴۲	۱۲	.۹۸۴	.۹۹۵۴۹	۳	۶۳۷	.۸۷۳	.۹۹۹۰۴	۳۰	.۹۹۹			.۹۹۹۰۴	۳۰	.۹۹۹			.۹۹۹۰۴	۳۰	.۹۹۹		
J	.۹۹۹۰۱	۱۶	۱/۰۲۷	.۹۹۹۱۴	۱۵	۱۲	۱/۰۱۷	.۹۹۱۳۹	۱۲	.۹۸۸	.۹۹۵۴۰	۳	۶۳۷	.۸۷۶	.۹۹۸۷۴	۳۵	.۹۹۹			.۹۹۸۷۴	۳۵	.۹۹۹			.۹۹۸۷۴	۳۵	.۹۹۹		
K	.۹۹۹۱۱	۱۵	۱/۰۱۳	.۹۹۹۴۱	۱۲	۱۹	.۹۹۷	.۹۹۶۸۹	۷	.۹۸۹	.۹۸۹۱۲	۵	۳۷۲	.۸۶۵	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۹			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۹			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۹		
G96LYP																													
A	.۹۹۹۶۵	۲۹	.۹۹۰	.۹۹۹۵۹	۳۰	۱۰	.۹۸۲	.۸۸۹۰۸	۱۴	.۹۸۱	.۹۹۵۲۰	۳	۷۳۲	.۸۴۰	.۹۹۹۲۲	۲۷	.۹۸۴			.۹۹۹۲۲	۲۷	.۹۸۴			.۹۹۹۲۲	۲۷	.۹۸۴		
B	.۹۹۸۳۴	۲۰	.۹۹۷	.۹۹۹۱۶	۱۵	۳۱	.۹۷۲	.۹۹۶۰۹	۱۱	.۹۸۲	.۹۹۲۲۰	۴	۵۷۱	.۸۹۴	.۹۹۹۵۱	۲۲	.۹۸۷			.۹۹۹۵۱	۲۲	.۹۸۷			.۹۹۹۵۱	۲۲	.۹۸۷		
C	.۹۹۸۲۳	۲۱	۱/۰۰۵	.۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	.۹۷۹	.۹۹۲۲۰	۱۱	.۹۸۲	.۹۹۵۷۵	۳	۶۱۱	.۸۸۰	.۹۹۹۷۵	۲۷	.۹۸۸			.۹۹۹۷۵	۲۷	.۹۸۸			.۹۹۹۷۵	۲۷	.۹۸۸		
D	.۹۹۹۲۴	۱۴	۱/۰۱۲	.۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	.۹۷۹	.۹۹۶۹۵	۸	.۹۸۷	.۹۹۴۳۱	۴	۴۴۸	.۸۳۸	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴		
E	.۹۹۹۳۶	۱۳	۱/۰۱۳	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۵	۱/۰۰۰	.۹۹۶۴۹	۸	.۹۸۷	.۹۹۳۶۸	۴	۴۳۹	.۸۴۱	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴		
F	.۹۹۹۳۷	۱۲	۱/۰۱۳	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱۴	۱/۰۰۲	.۹۹۶۰۹	۸	.۹۸۷	.۹۹۳۸۳	۴	۴۳۸	.۸۴۲	.۹۹۹۴۱	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۱	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۱	۲۴	.۹۹۴		
G	.۹۹۹۳۸	۱۲	۱/۰۱۰	.۹۹۹۵۱	۱۱	۱۳	۱/۰۰۲	.۹۹۳۷۹	۱۱	.۹۸۳	.۹۹۵۱۹	۳	۵۹۵	.۸۸۶	.۹۹۹۳۳	۲۵	.۹۹۱			.۹۹۹۳۳	۲۵	.۹۹۱			.۹۹۹۳۳	۲۵	.۹۹۱		
H	.۹۹۹۳۴	۱۳	۱/۰۱۴	.۹۹۹۵۵	۱۱	۱۴	.۹۹۸	.۹۹۱۶۳	۱۲	.۹۸۰	.۹۹۵۶۷	۳	۶۵۵	.۸۶۴	.۹۹۹۰۲	۳۱	.۹۸۹			.۹۹۹۰۲	۳۱	.۹۸۹			.۹۹۹۰۲	۳۱	.۹۸۹		
I	.۹۹۹۴۴	۱۲	۱/۰۱۶	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱۵	۱/۰۰۲	.۹۹۲۰۳	۱۲	.۹۸۲	.۹۹۵۵۱	۳	۶۶۱	.۸۷۰	.۹۹۹۰۵	۳۰	.۹۹۱			.۹۹۹۰۵	۳۰	.۹۹۱			.۹۹۹۰۵	۳۰	.۹۹۱		
J	.۹۹۸۳۷	۲۰	۱/۰۲۵	.۹۹۹۶۳	۱۰	۱۵	۱/۰۰۳	.۹۹۱۹۱	۱۲	.۹۸۶	.۹۹۶۶۴	۳	۶۶۸	.۸۷۱	.۹۹۸۶۳	۳۶	.۹۹۷			.۹۹۸۶۳	۳۶	.۹۹۷			.۹۹۸۶۳	۳۶	.۹۹۷		
K	.۹۹۹۱۹	۱۴	۱/۰۱۱	.۹۹۸۸۱	۱۸	۲۳	۱/۰۰۶	.۹۹۶۶۰	۷	.۹۸۷	.۹۹۱۴۹	۴	۳۸۵	.۸۵۹	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴			.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴		
BP86																													
A	.۹۹۷۷۴	۲۴	.۹۹۴	.۹۹۷۷۹	۲۴	۸	.۹۸۸	.۸۶۵۵۴	۱۷	.۹۷۹	.۹۹۷۰۴	۳	۸۳۴	.۸۰۵	.۹۹۹۳۵	۲۵	.۹۸۴			.۹۹۹۳۵	۲۵	.۹۸۴			.۹۹۹۳۵	۲۵	.۹۸۴		
B	.۹۹۸۸۵	۱۷	۱/۰۰۲	.۹۹۹۴۰	۱۳	۲۵	.۹۸۱	.۹۹۸۶۵	۱۲	.۹۸۱	.۹۹۷۵۷	۲	۶۵۳	.۸۶۵	.۹۹۹۴۴	۲۳	.۹۸۷			.۹۹۹۴۴	۲۳	.۹۸۷			.۹۹۹۴۴	۲۳	.۹۸۷		
C	.۹۹۸۸۶	۱۷	۱/۰۱۱	.۹۹۹۳۱	۱۳	۲۳	.۹۹۲	.۸۹۶۰۰	۱۴	.۹۸۰	.۹۹۶۷۸	۳	۷۱۷	.۸۴۴	.۹۹۹۰۹	۳۰	.۹۸۹			.۹۹۹۰۹	۳۰	.۹۸۹			.۹۹۹۰۹	۳۰	.۹۸۹		
D	.۹۹۹۲۶	۱۴	۱/۰۱۹	.۹۹۹۳۷	۱۳	۱۲	۱/۰۱۰	.۹۹۳۸۳	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۶۰	۳	۵۷۹	.۸۶۴	.۹۹۹۰۷	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۷	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۷	۳۰	.۹۹۵		
E	.۹۹۹۵۵	۱۱	۱/۰۲۰	.۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰۱۲	.۹۹۶۷۸	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	.۸۰۱	.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵		
F	.۹۹۹۵۶	۱۰	۱/۰۲۰	.۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰۱۲	.۹۹۶۷۸	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	.۸۰۱	.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵			.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵		
G	.۹۹۹۵۸	۱۰	۱/۰۱۷	.۹۹۹۷۰	۹	۱۲	۱/۰۰۷	.۸۹۷۲۹	۱۳	.۹۸۲	.۹۹۶۳۸	۳	۷۱۳	.۸۶۶	.۹۹۹۰۳	۳۰	.۹۹۱			.۹۹۹۰۳	۳۰	.۹۹۱			.۹۹۹۰۳	۳۰	.۹۹۱		
H	.۹۹۹۱۶	۱۴	۱/۰۱۹	.۹۹۹۲۸	۱۴	۱۲	۱/۰۰۹	.۸۷۶۶۷	۱۵	.۹۷۷	.۹۹۴۱۴	۴	۷۶۱	.۸۷۷	.۹۹۸۵۸	۳۷	.۹۸۹			.۹۹۸۵۸	۳۷	.۹۸۹			.۹۹۸۵۸	۳۷	.۹۸۹		
I	.۹۹۹۴۶	۱۲	۱/۰۲۱	.۹۹۹۵۶	۱۱	۱۱	۱/۰۱۲	.۸۸۲۱۴	۱۴	.۹۸۰	.۹۹۴۵۸	۳	۷۶۸	.۸۷۳	.۹۹۸۶۶	۳۶	.۹۹۱			.۹۹۸۶۶	۳۶	.۹۹۱			.۹۹۸۶۶	۳۶	.۹۹۱		

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm ⁻¹ پائین						۲۰۰۰cm ⁻¹ بالای						کل فرکانسها						
	روش ۱			روش ۲			روش ۱			روش ۲			روش ۱			روش ۲			
	R ²	SD	α	R ²	SD	β	R ²	SD	α	R ²	SD	β	R ²	SD	α	R ²	SD	α	
J	.۹۹۸۴۴	۲۰	۱/۰.۲۰	.۹۹۸۵۸	۱۹	۱۳	.۸۶۹۹۰	۱۵	.۹۹۸۳	.۹۹۴۴۳	۳	۷۸۲	.۹۹۸۱۶	۴۲	.۸۷۵	.۹۹۸۱۶	۴۲	.۹۹۹۶	
K	.۹۹۹۲۱	۱۴	۱/۰.۲۰	.۹۹۹۵۱	۱۱	۱۹	.۹۴۷۴۲	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۴۴	۳	۵۳۹	.۹۹۹۰۵	۳۰	.۸۰۷	.۹۹۹۰۵	۳۰	.۹۹۵	
B3P86																			
A	.۹۹۸۶۴	۱۸	.۹۵۹	.۹۹۸۶۷	۱۹	۶	.۸۶۸۶۵	۱۵	.۹۵۰	.۹۹۵۱۴	۳	۷۸۱	.۹۹۹۶۳	۱۹	.۸۰۱	.۹۹۹۶۳	۱۹	.۹۵۳	
B	.۹۹۸۶۴	۱۸	.۹۶۶	.۹۹۹۳۴	۱۳	۲۸	.۹۲۶۸۳	۱۱	.۹۵۱	.۹۹۶۳۳	۳	۶۲۱	.۹۹۹۵۳	۲۱	.۸۵۲	.۹۹۹۵۳	۲۱	.۹۵۵	
C	.۹۹۷۸۵	۲۳	.۹۷۵	.۹۹۸۸۰	۱۸	۳۳	.۹۰۱۵۰	۱۳	.۹۵۱	.۹۹۵۱۴	۳	۶۹۸	.۹۹۹۱۲	۲۹	.۸۷۸	.۹۹۹۱۲	۲۹	.۹۵۸	
D	.۹۹۸۸۶	۱۷	.۹۸۳	.۹۹۹۰۲	۱۶	۱۴	.۹۴۰۰۲	۱۰	.۹۵۷	.۹۹۴۵۴	۳	۵۶۴	.۹۹۹۲۹	۲۶	.۸۷۶	.۹۹۹۲۹	۲۶	.۹۶۴	
E	.۹۹۹۲۳	۱۴	.۹۸۳	.۹۹۹۴۲	۱۲	۱۵	.۹۴۳۲۱	۱۰	.۹۵۷	.۹۹۵۱۱	۳	۵۵۳	.۹۹۹۳۴	۲۵	.۸۷۹	.۹۹۹۳۴	۲۵	.۹۶۵	
F	.۹۹۹۲۷	۱۳	.۹۸۳	.۹۹۹۴۰	۱۳	۱۳	.۹۴۱۲۷	۱۰	.۹۵۸	.۹۹۵۴۰	۳	۵۶۲	.۹۹۹۳۵	۲۵	.۸۷۶	.۹۹۹۳۵	۲۵	.۹۶۵	
G	.۹۹۹۲۸	۱۳	.۹۷۹	.۹۹۹۴۸	۱۲	۱۵	.۹۰۵۸۷	۱۳	.۹۵۲	.۹۹۴۷۰	۳	۶۸۴	.۹۹۹۲۸	۲۶	.۸۳۳	.۹۹۹۲۸	۲۶	.۹۶۰	
H	.۹۹۸۷۵	۱۸	.۹۸۲	.۹۹۸۹۲	۱۷	۱۴	.۸۷۴۸۳	۱۵	.۹۴۹	.۹۸۹۸۹	۵	۷۵۶	.۹۹۸۹۲	۳۲	.۸۰۸	.۹۹۸۹۲	۳۲	.۹۵۸	
I	.۹۹۹۰۱	۱۶	.۹۸۳	.۹۹۹۱۷	۱۵	۱۴	.۸۸۳۴۶	۱۴	.۹۵۰	.۹۸۹۹۹	۵	۷۳۴	.۹۹۸۹۸	۳۱	.۸۱۶	.۹۹۸۹۸	۳۱	.۹۵۹	
J	.۹۹۷۳۳	۲۶	.۹۹۲	.۹۹۷۶۴	۲۵	۱۹	.۸۷۰۴۴	۱۵	.۹۵۳	.۹۸۹۸۹	۵	۷۶۷	.۹۹۸۳۶	۴۰	.۸۰۸	.۹۹۸۳۶	۴۰	.۹۶۴	
K	.۹۹۸۹۵	۱۶	.۹۸۳	.۹۹۹۲۶	۱۴	۱۹	.۹۵۱۸۲	۹	.۹۵۸	.۹۹۶۶۷	۳	۵۱۹	.۹۹۹۳۱	۲۶	.۸۷۰	.۹۹۹۳۱	۲۶	.۹۶۵	
SWN5																			
A	.۹۹۸۹۳	۱۶	.۹۹۷	.۹۹۸۹۳	۱۷	۰	.۸۷۷۱۸	۲۰	.۹۷۶	.۹۹۴۴۰	۴	۹۴۷	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۶۶۵	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۸۲	
B	.۹۹۶۶۴	۲۹	۱/۰.۰۷	.۹۹۷۲۷	۲۷	۲۷	.۸۵۷۷۹	۱۶	.۹۷۷	.۹۹۵۷۸	۳	۸۰۷	.۹۹۸۶۷	۳۶	.۸۱۲	.۹۹۸۶۷	۳۶	.۹۵۵	
C	.۹۹۵۹۱	۳۲	۱/۰.۱۶	.۹۹۶۶۰	۳۱	۲۴	.۸۲۵۶۷	۱۸	.۹۷۷	.۹۹۲۱۱	۴	۸۶۷	.۹۹۸۰۶	۴۳	.۶۹۲	.۹۹۸۰۶	۴۳	.۹۸۷	
D	.۹۹۶۲۷	۳۰	۱/۰.۲۶	.۹۹۶۳۶	۳۱	۱۱	.۸۸۶۷۷	۱۴	.۹۸۴	.۹۹۳۴۰	۴	۷۳۴	.۹۹۸۰۴	۴۳	.۸۴۱	.۹۹۸۰۴	۴۳	.۹۹۵	
E	.۹۹۷۰۷	۲۷	۱/۰.۲۷	.۹۹۷۰۹	۲۸	۵	.۸۹۱۸۳	۱۴	.۹۸۴	.۹۹۲۶۴	۴	۷۱۹	.۹۹۸۱۵	۴۲	.۸۷۶	.۹۹۸۱۵	۴۲	.۹۹۶	
F	.۹۹۷۱۶	۲۷	۱/۰.۲۷	.۹۹۷۱۹	۲۷	۶	.۸۹۱۸۳	۱۴	.۹۸۴	.۹۹۲۶۴	۴	۷۱۹	.۹۹۸۱۷	۴۲	.۸۷۶	.۹۹۸۱۷	۴۲	.۹۹۶	
G	.۹۹۷۴۰	۲۵	۱/۰.۲۳	.۹۹۷۴۷	۲۶	۱۰	.۸۳۷۴۱	۱۷	.۹۷۹	.۹۹۲۷۶	۴	۸۴۳	.۹۹۸۱۳	۴۲	.۸۰۲	.۹۹۸۱۳	۴۲	.۹۹۱	
H	.۹۹۶۰۷	۳۱	۱/۰.۲۵	.۹۹۶۱۲	۳۲	۸	.۸۹۸۶۵	۱۹	.۹۷۴	.۹۸۳۵۴	۶	۸۹۹	.۹۹۷۴۵	۴۹	.۶۸۰	.۹۹۷۴۵	۴۹	.۹۸۸	
I	.۹۹۶۶۷	۳۰	۱/۰.۲۷	.۹۹۶۶۰	۳۰	۶	.۸۰۶۵۲	۱۸	.۹۷۷	.۹۸۴۷۴	۶	۸۸۷	.۹۹۷۵۴	۴۸	.۶۸۶	.۹۹۷۵۴	۴۸	.۹۹۱	
J	.۹۹۲۵۱	۴۳	۱/۰.۳۷	.۹۹۲۹۰	۴۳	۲۱	.۸۸۸۶	۱۹	.۹۸۰	.۹۸۸۷۵	۵	۹۲۲	.۹۹۶۲۸	۶۰	.۶۷۶	.۹۹۶۲۸	۶۰	.۹۹۵	
K	.۹۹۵۳۳	۳۴	۱/۰.۲۸	.۹۹۵۷۹	۳۳	۲۳	.۸۹۵۷۴	۱۴	.۹۸۵	.۹۹۵۰۰	۳	۷۱۴	.۹۹۷۷۸	۴۶	.۸۴۸	.۹۹۷۷۸	۴۶	.۹۹۶	
B3PW91																			
A	.۹۹۸۵۴	۱۹	.۹۵۹	.۹۹۸۵۷	۱۹	۶	.۸۶۹۴۱	۱۵	.۹۵۲	.۹۹۵۱۴	۳	۷۸۴	.۹۹۹۶۲	۱۹	.۸۰۱	.۹۹۹۶۲	۱۹	.۹۵۴	
B	.۹۹۸۴۹	۱۹	.۹۶۷	.۹۹۹۳۳	۱۳	۳۱	.۹۲۴۸۱	۱۲	.۹۵۲	.۹۹۵۶۵	۳	۶۲۶	.۹۹۹۵۱	۲۲	.۸۷۲	.۹۹۹۵۱	۲۲	.۹۵۶	

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	2000 cm ⁻¹ پایین						2000 cm ⁻¹ بالایی						کل فرکانسها					
	روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲			
	R ²	SD	α	R ²	SD	β	α	R ²	SD	α	R ²	SD	β	α	R ²	SD	α	
C	۰/۹۹۵۴	۱۹	۰/۹۷۵	۰/۹۹۹۱۰	۱۵	۲۶	۰/۹۵۵	۰/۸۸۸۷	۱۳	۰/۹۵۳	۰/۹۹۴۲۷	۴	۷۰۳	۰/۸۷۷	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۵۹	
D	۰/۹۹۸۹۴	۱۶	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۱۲	۱۵	۱۵	۰/۹۷۲	۰/۹۹۹۲۸	۱۰	۰/۹۵۹	۰/۹۹۴۵۴	۳	۵۶۷	۰/۸۷۶	۰/۹۹۹۳۲	۲۵	۰/۹۶۶	
E	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۴۷	۱۲	۱۳	۰/۹۷۴	۰/۹۴۲۸۹	۱۰	۰/۹۵۹	۰/۹۹۳۸۴	۴	۵۴۹	۰/۸۸۲	۰/۹۹۹۳۷	۲۵	۰/۹۶۶	
F	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۴۸	۱۲	۱۳	۰/۹۷۴	۰/۹۴۶۳۰	۱۰	۰/۹۵۹	۰/۹۹۴۶۳	۳	۵۳۷	۰/۸۸۶	۰/۹۹۹۳۸	۲۴	۰/۹۶۶	
G	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۰/۹۸۰	۰/۹۹۹۵۳	۱۱	۱۵	۰/۹۶۸	۰/۹۰۹۹۰	۱۳	۰/۹۵۴	۰/۹۹۴۰۹	۴	۶۷۰	۰/۸۳۹	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۱	
H	۰/۹۹۸۸۷	۱۷	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۰۴	۱۶	۱۴	۰/۹۷۱	۰/۸۸۹۹۸	۱۵	۰/۹۵۰	۰/۸۸۸۹۳	۵	۷۴۴	۰/۸۷۲	۰/۹۹۸۹۶	۳۱	۰/۹۵۹	
I	۰/۹۹۹۱۲	۱۵	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۱۴	۰/۹۷۳	۰/۸۸۵۰۹	۱۴	۰/۹۵۱	۰/۸۹۹۴۳	۵	۷۲۹	۰/۸۷۸	۰/۹۹۹۰۱	۳۱	۰/۹۶۰	
J	۰/۹۹۷۳۵	۲۶	۰/۹۹۲	۰/۹۹۷۷۴	۲۴	۲۱	۰/۹۷۵	۰/۸۶۹۹۱	۱۵	۰/۹۵۴	۰/۸۸۸۲۳	۵	۷۶۴	۰/۸۰۹	۰/۹۹۸۳۹	۳۹	۰/۹۶۵	
K	۰/۹۹۸۸۱	۱۷	۰/۹۸۵	۰/۹۹۹۲۰	۱۵	۲۱	۰/۹۶۸	۰/۹۵۶۷۶	۹	۰/۹۵۹	۰/۹۹۶۱۷	۳	۵۰۴	۰/۸۹۷	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۶	
MP2																		
A	۰/۹۹۱۴۹	۴۶	۰/۹۴۸	۰/۹۹۱۴۹	۴۷	-۳	۰/۹۵۰	۰/۹۱۰۵۴	۱۳	۰/۹۵۱	۰/۹۷۹۴۴	۷	۶۲۳	۰/۸۵۱	۰/۹۹۸۳۳	۴۰	۰/۹۵۰	
B	۰/۹۹۸۹۷	۱۶	۰/۹۴۸	۰/۹۹۹۱۳	۱۵	۱۴	۰/۹۳۸	۰/۸۶۳۲۱	۱۶	۰/۹۳۶	۰/۹۶۷۰۹	۹	۷۳۴	۰/۸۰۵	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۳۹	
C	۰/۹۹۸۹۸	۱۶	۰/۹۵۱	۰/۹۹۹۲۲	۱۴	۱۷	۰/۹۳۸	۰/۸۳۹۲۷	۱۷	۰/۹۲۸	۰/۹۷۲۶۶	۸	۸۰۴	۰/۶۸۷	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۳۵	
D	۰/۹۹۹۶۵	۹	۰/۹۷۲	۰/۹۹۹۷۲	۹	۹	۰/۹۶۵	۰/۸۷۰۰۰	۱۵	۰/۹۴۴	۰/۹۶۸۰۴	۸	۷۱۸	۰/۸۷۱	۰/۹۹۹۳۲	۲۵	۰/۹۵۲	
E	۰/۹۹۹۶۶	۹	۰/۹۷۳	۰/۹۹۹۶۸	۹	۷	۰/۹۶۸	۰/۸۷۴۵۱	۱۵	۰/۹۴۵	۰/۹۷۰۹۹	۸	۷۱۳	۰/۸۷۹	۰/۹۹۹۳۰	۲۶	۰/۹۵۳	
F	۰/۹۹۹۶۶	۹	۰/۹۷۴	۰/۹۹۹۷۰	۹	۹	۰/۹۶۷	۰/۸۷۲۷۵	۱۵	۰/۹۴۵	۰/۹۷۱۸۷	۸	۷۲۰	۰/۸۷۱	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۳	
G	۰/۹۹۸۹۲	۱۶	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۰۸	۱۶	۱۴	۰/۹۴۹	۰/۸۳۶۷۲	۱۷	۰/۹۳۱	۰/۹۷۳۲۰	۸	۸۱۰	۰/۶۸۸	۰/۹۹۹۱۱	۲۹	۰/۹۳۹	
H	۰/۹۹۹۲۵	۱۴	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۶	۰/۹۵۶	۰/۸۰۷۴۴	۲۳	۰/۹۳۰	۰/۹۵۲۰۸	۱۰	۹۵۲	۰/۶۱۷	۰/۹۹۹۰۳	۳۰	۰/۹۳۸	
I	۰/۹۹۹۰۶	۱۵	۰/۹۶۴	۰/۹۹۹۰۶	۱۶	۳	۰/۹۶۲	۰/۸۶۷۵۲	۲۱	۰/۹۳۲	۰/۹۶۰۵۸	۹	۹۵۲	۰/۶۳۴	۰/۹۹۸۹۳	۳۲	۰/۹۴۱	
J	۰/۹۹۹۲۸	۱۳	۰/۹۸۱	۰/۹۹۹۲۵	۱۳	۹	۰/۹۷۴	۰/۸۹۷۰۳	۱۹	۰/۹۴۰	۰/۹۵۸۰۰	۱۰	۸۶۴	۰/۶۶۷	۰/۹۹۸۵۶	۳۷	۰/۹۵۲	
HF																		
D	۰/۹۹۸۶۲	۱۸	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۱۷	۱۵	۲۵	۰/۹۶۴	۰/۸۰۱۳۴	۱۹	۰/۹۵۶	۰/۹۳۰۱۶	۱۲	۸۰۶	۰/۶۹۷	۰/۹۹۹۰۷	۳۰	۰/۹۶۴	
B	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۲۵	۱۴	۱۳	۰/۹۷۳	۰/۸۷۹۰۰	۱۵	۰/۹۵۷	۰/۹۰۵۲۵	۱۴	۶۷۹	۰/۸۰۳	۰/۹۹۹۲۵	۲۷	۰/۹۶۴	
MP3																		
D	۰/۹۹۸۷۶	۱۷	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۲۴	۰/۹۶۲	۰/۶۶۹۲۸	۲۴	۰/۹۵۸	۰/۸۳۶۸۰	۱۹	۹۲۳	۰/۶۶۱	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۶۵	
B	۰/۹۹۸۳۳	۲۰	۰/۹۸۳	۰/۹۹۸۹۷	۱۶	۲۷	۰/۹۶۱	۰/۸۴۰۳۱	۲۱	۰/۹۵۷	۰/۸۳۶۶۳	۱۹	۷۵۳	۰/۸۷۵	۰/۹۹۹۱۰	۲۹	۰/۹۶۵	

^aA, B, C, D, E, F, G, H, I, J, and K stand for 6-31G, 6-31G*, 6-31G**, 6-31IG**, 6-31II+G**, 6-31II+G**, 6-31III+G**, 6-31III+G**, D95+**, D95+**, D95+**, and cc-pVTZ basis sets, respectively.

جدول ۲- مقادیر شدتهای تجربی و نظری مادون قرمز استون^a.

Levels/basis sets	Frequency range(cm ⁻¹)										R ²	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp ⁵	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
B3LYP													
A	۱/۴	۱۵	۰/۳۳	۴/۹	۵/۹	۹۲/۳	۹۲	۱۴۴	۵۴/۹	۰/۹۵۰۶۳	۱۲	۰/۹۳۸-۰/۰۵۹	
B	۱/۲	۱۵	۰/۹۲	۶/۷	۴/۳	۷۸/۸	۱۱۱	۱۵۲	۵۳/۱	۰/۹۹۵۷۳	۴	۰/۹۰۹-۰/۰۱۷	
C	۳/۱	۱۵	۰/۹۲	۶/۵	۴/۱	۷۶/۲	۱۱۲	۱۵۳	۵۰/۰	۰/۹۹۸۳۱	۲	۰/۹۱۱-۰/۰۱۱	
D	۱/۱	۱۵	۱/۴۹	۹/۱	۲/۳	۷۶/۴	۱۳۶	۱۷۴	۵۷/۵	۰/۹۹۷۴۷	۳	۰/۷۹۵-۰/۰۱۱	
E	۶/۱	۱۴	۱/۷۰	۸/۵	۲/۵	۷۵/۷	۱۴۰	۲۱۰	۴۸/۵	۰/۹۸۰۴۷	۸	۰/۷۱۱-۰/۰۲۸	
F	۶/۱	۱۴	۱/۶۹	۸/۵	۲/۶	۷۴/۸	۱۳۹	۲۰۸	۴۹/۱	۰/۹۸۱۳۲	۷	۰/۷۱۷-۰/۰۲۸	
G	۵/۱	۱۵	۱/۳۲	۶/۷	۲/۴	۷۲/۷	۱۳۹	۱۹۸	۴۸/۷	۰/۹۸۵۴۹	۷	۰/۷۴۲-۰/۰۲۵	
H	۸/۱	۱۳	۰/۸۳	۴/۳	۵/۹	۷۲/۷	۱۶۹	۱۸۷	۵۳/۷	۰/۹۶۸۷۷	۱۰	۰/۷۱۰-۰/۰۳۶	
I	۵/۱	۱۴	۱/۱۲	۵/۶	۲/۳	۶۴/۹	۱۴۹	۲۰۳	۶۶/۹	۰/۸۱۶۸۱	۲۳	۰/۶۸۷-۰/۰۸۷	
J	۱/۱	۱۵	۱/۲۶	۵/۶	۳	۷۱/۷	۱۲۱	۱۶۵	۴۵/۲	۰/۹۹۶۷۷	۳	۰/۸۶۴-۰/۰۱۴	
K	۵/۱	۱۵	۱/۷۷	۸/۴	۲/۲	۷۹/۷	۱۱۹	۱۷۵	۴۷/۸	۰/۹۹۵۰	۴	۰/۸۲۷-۰/۰۱۷	
B972													
A	۱/۵	۱۵	۰/۲۷	۳/۶	۶/۸	۹۲/۲	۱۵۵	۱۲۱	۴۹/۹	۰/۸۸۵۲۴	۱۷	۰/۸۳۳-۰/۰۷۷	
B	۱/۳	۱۵	۰/۸۷	۵/۴	۵/۱	۷۵/۶	۱۲۹	۱۶۱	۴۹	۰/۹۹۶۰۹	۳	۰/۸۵۰-۰/۰۱۴	
C	۱/۴	۱۵	۰/۸۷	۵/۱	۴/۹	۷۱/۷	۱۳۲	۱۶۳	۴۵/۸	۰/۹۹۳۰۱	۴	۰/۸۴۸-۰/۰۱۹	
D	۱/۳	۱۵	۱/۳۰	۷/۲	۳/۶	۷۰/۶	۱۴۸	۱۸۴	۵۶/۱	۰/۹۸۸۵۷	۵	۰/۷۵۸-۰/۰۲۱	
E	۱/۶	۱۴	۱/۶۱	۶/۹	۳/۲	۷۰	۱۴۹	۲۱۵	۴۸/۷	۰/۹۷۴۰۷	۸	۰/۰۶۹۳/۰۳۰	
F	۱/۶	۱۴	۱/۵۴	۶/۹	۳/۲	۶۹	۱۴۹	۲۱۴	۴۹/۴	۰/۹۷۴۱۳	۸	۰/۶۹۵-۰/۰۳۰	
G	۱/۶	۱۴	۱/۲۹	۵/۶	۳/۱	۶۷/۹	۱۵۱	۲۰۳	۴۶/۴	۰/۹۷۵۳۲	۸	۰/۷۱۶-۰/۰۳۰	
H	۱/۷	۱۴	۰/۹۷	۴/۷	۶/۳	۶۷/۱	۱۷۲	۱۹۹	۵۳/۳	۰/۹۶۶۰۳	۹	۰/۶۸۷-۰/۰۳۴	
I	۱/۵	۱۴	۱/۲۰	۵/۲	۳/۱	۶۰/۳	۱۵۴	۲۰۹	۶۳/۹	۰/۹۶۸۸۹	۹	۰/۶۹۴-۰/۰۳۳	
J	۱/۲	۱۵	۱/۱۵	۵/۵	۴/۳	۶۱/۲	۱۴۱	۱۷۷	۳۹/۸	۰/۹۷۴۰	۸	۰/۸۰۰-۰/۰۳۴	
K	۱/۵	۱۵	۱/۶۲	۷/۷	۳/۱	۶۹/۱	۱۳۵	۱۸۱	۴۶/۶	۰/۹۸۹۴۷	۵	۰/۷۹۴-۰/۰۲۲	
BLYP													
A	۲/۱	۱۲	۰/۸۲	۹/۵	۵/۱	۹۷	۱۲۰	۹۶	۶۹/۸	۰/۸۱۹۳۹	۲۲	۰/۹۳۴-۰/۱۱۰	
B	۱/۱	۱۲	۱/۴۷	۱۱	۳/۸	۸۶/۲	۹۴	۱۳۲	۶۵/۱	۰/۹۴۹۵۳	۱۱	۰/۹۷۰-۰/۰۵۸	
C	۲/۱	۱۲	۱/۴۹	۱۰/۸	۳/۵	۸۴/۶	۹۳	۱۳۳	۶۰/۸	۰/۹۵۹	۱۰	۰/۹۸۲-۰/۰۵۳	
D	۱/۰	۱۲	۲/۳۹	۱۵	۲/۳	۸۵/۳	۱۱۹	۱۵۳	۶۸/۱	۰/۹۷۹۶۶	۷	۰/۸۵۶-۰/۰۳۲	
E	۵/۱	۱۱	۲/۷۷	۱۴	۱/۸	۸۵/۲	۱۲۸	۱۹۰	۵۵/۹	۰/۹۹۲۰۴	۵	۰/۷۶۳-۰/۰۱۸	
F	۵/۱	۱۱	۲/۷۰	۱۴	۱/۹	۸۴/۱	۱۲۷	۱۸۸	۵۷/۲	۰/۹۹۲۴۶	۴	۰/۷۷۰-۰/۰۱۸	
G	۴/۱	۱۲	۲/۲۶	۱۱/۵	۱/۸	۸۲/۹	۱۲۶	۱۸۱	۵۸/۵	۰/۹۹۵۱۵	۴	۰/۷۸۹-۰/۰۱۵	
H	۸/۱	۱۰	۱/۴۶	۷/۳	۶	۸۶/۱	۱۵۸	۱۶۴	۵۸/۶	۰/۹۷۱۴۸	۹	۰/۷۶۱-۰/۰۳۴	
I	۴/۱	۱۱	۲/۰۱	۹/۸	۱/۷	۷۵/۷	۱۳۸	۱۸۵	۷۷/۰	۰/۹۸۴۲۵	۶	۰/۷۵۰-۰/۰۲۵	
J	۹/۰	۱۳	۲/۰۷	۱۱/۴	۲/۷	۷۷/۹	۱۰۲	۱۴۴	۵۶/۴	۰/۹۸۱۳۷	۶	۰/۹۵۰-۰/۰۲۸	
K	۳/۱	۱۲	۲/۷۵	۱۵/۶	۱/۹	۸۳/۷	۱۰۸	۱۵۴	۵۶/۱	۰/۹۸۶۳۶	۶	۰/۸۹۴-۰/۰۲۸	

ادامه جدول 2.

Levels/basis sets	Frequency range(cm ⁻¹)									R ²	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰			
Exp/ ⁵	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷			
G96LYP												
A	۴/۱	۱۲	۰/۸۱	۹/۳	۵/۴	۹۹/۲	۱۲۴	۹۹	۷۲/۴	۰/۸۲۰۱۵	۲۲	۰/۹۰۶-۰/۱۰۷
B	۲/۱	۱۲	۱/۴۷	۱۰/۹	۴/۱	۸۸	۹۸	۱۳۵	۶۶/۹	۰/۹۵۱۳	۱۱	۰/۹۴۵-۰/۰۵۶
C	۳/۱	۱۲	۱/۴۸	۱۰/۶	۳/۸	۸۶/۳	۹۷	۱۳۶	۶۲/۶	۰/۹۵۸۷	۱۰	۰/۹۵۷-۰/۰۵۰
D	۱/۱	۱۲	۲/۲۶	۱۴/۴	۲/۸	۸۷/۶	۱۲۴	۱۵۷	۶۵	۰/۹۸۴۷۴	۶	۰/۸۳۷-۰/۰۲۷
E	۵/۱	۱۱	۲/۷۲	۱۳/۳	۲/۲	۸۶/۶	۱۲۹	۱۹۱	۵۶	۰/۹۹۲۳۵	۴	۰/۷۵۸-۰/۰۱۸
F	۵/۱	۱۱	۲/۶۷	۱۶/۱	۲/۴	۸۵/۸	۱۲۸	۱۹۰	۵۶/۶	۰/۹۹۱۵۹	۵	۰/۷۶۲-۰/۰۱۸
G	۴/۱	۱۲	۲/۲۴	۱۱/۱	۲/۳	۸۵	۱۲۵	۱۸۲	۵۹/۷	۰/۹۹۴۳۳	۴	۰/۷۸۵-۰/۰۱۶
H	۸/۱	۱۰	۱/۵۱	۷/۸	۵/۷	۸۷/۵	۱۵۴	۱۶۸	۶۴/۴	۰/۹۷۹	۷	۰/۷۵۶-۰/۰۲۹
I	۵/۱	۱۱	۲/۰۳	۹/۶	۲/۱	۷۷/۷	۱۳۷	۱۸۷	۷۷/۹	۰/۹۸۴۶۲	۶	۰/۷۴۵-۰/۰۲۴
J	۱/۰	۱۲	۲/۰۱	۱۱/۲	۳	۸۰/۳	۱۰۶	۱۴۸	۵۶/۲	۰/۹۸۸۶۹	۵	۰/۹۲۴-۰/۰۲۶
K	۴/۱	۱۲	۲/۷۳	۱۵/۳	۲/۲	۸۵/۸	۱۱۰	۱۵۹	۵۴/۹	۰/۹۸۷۲۹	۶	۰/۸۷۳-۰/۰۲۶
BP86												
A	۴/۱	۱۲	۰/۷۳	۶/۳	۵/۹	۹۶/۶	۱۴۸	۱۰۲	۵۸	۰/۸۲۱۰۶	۲۱	۰/۸۵۸-۰/۰۱۰
B	۲/۱	۱۲	۱/۳۹	۸	۴/۷	۸۰/۸	۱۲۴	۱۳۸	۵۲/۷	۰/۹۸۰۱۷	۷	۰/۹۱۲-۰/۰۳۴
C	۳/۱	۱۲	۱/۳۹	۷/۷	۴/۴	۷۷	۱۲۴	۱۳۹	۴۹/۱	۰/۹۸۴۴۵	۶	۰/۹۲۱-۰/۰۳۰
D	۱/۱	۱۲	۲/۰۷	۱۰/۳	۳/۱	۷۷/۲	۱۴۹	۱۵۹	۵۲/۷	۰/۹۷۷۱۹	۸	۰/۸۰۴-۰/۰۳۲
E	۵/۱	۱۱	۲/۵۰	۹/۵	۲/۴	۷۶/۱	۱۵۵	۱۹۳	۴۴/۵	۰/۹۸۰۱۸	۷	۰/۷۲۷-۰/۰۲۷
F	۵/۱	۱۱	۲/۴۵	۹/۶	۲/۵	۷۵/۲	۱۵۴	۱۹۲	۴۵/۶	۰/۹۸۱۱۴	۷	۰/۷۳۱-۰/۰۲۷
G	۴/۱	۱۲	۲/۰۷	۷/۹	۲/۴	۷۳/۹	۱۵۳	۱۸۳	۴۸/۵	۰/۹۸۲۷۸	۷	۰/۷۵۱-۰/۰۲۶
H	۷/۱	۱۱	۱/۴۰	۵/۷	۵/۸	۷۳	۱۸۳	۱۷۱	۵۱/۸	۰/۹۳۴۵۴	۱۳	۰/۷۰۹-۰/۰۴۹
I	۴/۱	۱۱	۱/۹۰	۷/۱	۲/۱	۶۵/۲	۱۶۱	۱۸۹	۶۶/۷	۰/۹۷۱۵۳	۹	۰/۷۱۸-۰/۰۳۲
J	۱/۰	۱۲	۱/۸۲	۷/۹	۳/۵	۶۵/۸	۱۳۷	۱۵۰	۴۲/۲	۰/۹۷۶۳۵	۸	۰/۸۷۶-۰/۰۳۶
K	۱/۱	۱۲	۲/۵۲	۱۱/۱	۲/۴	۷۵/۵	۱۳۴	۱۶۰	۴۴/۶	۰/۹۸۹۵۲	۵	۰/۸۴۵-۰/۰۲۳
B3P86												
A	۵/۱	۱۵	۰/۲۸	۳/۰	۶/۹	۸۹/۰	۱۶۷	۱۱۹	۴۳/۷	۰/۸۵۰۹	۲۰	۰/۸۰۶-۰/۰۸۶
B	۳/۱	۱۵	۰/۸۶	۴/۶	۵/۲	۷۱/۳	۱۴۱	۱۵۷	۴۱/۶	۰/۹۷۹۲۸	۷	۰/۸۴۲-۰/۰۳۲
C	۴/۱	۱۵	۰/۸۴	۴/۳	۵/۰	۶۶/۶	۱۴۴	۱۵۸	۳۸/۶	۰/۹۷۰۶	۹	۰/۸۳۷-۰/۰۳۸
D	۳/۱	۱۵	۱/۳۰	۶/۱	۳/۹	۶۶/۱	۱۶۵	۱۸۱	۴۲/۸	۰/۹۵۹۴۷	۱۰	۰/۷۳۸-۰/۰۴۰
E	۶/۱	۱۴	۱/۵۲	۵/۶	۳/۳	۶۴/۷	۱۶۶	۲۱۲	۳۷/۱	۰/۹۵۲۱۴	۱۱	۰/۶۷۸-۰/۰۴۰
F	۶/۱	۱۴	۱/۴۸	۵/۷	۳/۴	۶۴/۰	۱۶۵	۲۱۰	۳۸/۱	۰/۹۵۳۵۲	۱۱	۰/۶۸۴-۰/۰۳۹
G	۶/۱	۱۴	۱/۲۲	۴/۵	۳/۲	۶۲/۸	۱۶۵	۲۰۰	۳۸/۵	۰/۹۵۳۴	۱۱	۰/۷۰۳-۰/۰۴۱
H	۷/۱	۱۴	۰/۸۱	۳/۲	۵/۷	۵۹/۸	۱۹۲	۱۹۴	۴۶/۱	۰/۹۲۲۳۷	۱۴	۰/۶۶۳-۰/۰۵۰
I	۵/۱	۱۴	۱/۰۶	۳/۹	۲/۹	۵۴/۲	۱۷۱	۲۰۶	۵۶/۱	۰/۹۴۸۳۱	۱۲	۰/۶۷۹-۰/۰۴۱
J	۲/۱	۱۵	۱/۱۴	۴/۵	۴/۵	۵۴/۷	۱۵۷	۱۷۳	۳۲/۳	۰/۹۳۷۵۷	۱۳	۰/۷۷۹-۰/۰۵۲
K	۵/۱	۱۵	۱/۶۷	۶/۹	۳/۳	۶۵/۱	۱۴۷	۱۸۱	۳۶/۵	۰/۹۷۰۲۴	۹	۰/۷۷۷-۰/۰۳۶

ادامه جدول ۲.

Levels/basis sets	Frequency range (cm ⁻¹)										R ²	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp/ ^δ	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
SVWN5													
A	۱/۶	۱۳	۰/۴۸	۱/۴	۹/۵	۶۳/۸	۲۴۱	۱۱۳	۲۰/۴	۰/۵۷۲۰۸	۳۳	۰/۶۱۰-۰/۱۲۱	
B	۱/۴	۱۳	۰/۹۷	۲/۲	۷/۸	۳۸/۸	۲۱۷	۱۴۲	۱۶/۰	۰/۶۸۲۸۷	۲۹	۰/۶۶۳-۰/۱۰۹	
C	۱/۵	۱۳	۰/۹۴	۲/۱	۷/۴	۳۱/۸	۲۱۸	۱۴۲	۱۴/۱	۰/۶۵۹۲۱	۳۰	۰/۶۵۷-۰/۱۱۲	
D	۱/۳	۱۴	۱/۷۶	۴/۰	۶/۲	۳۱/۴	۲۵۱	۱۶۶	۱۵/۴	۰/۶۵۰۳۸	۳۰	۰/۵۶۸-۰/۰۹۹	
E	۱/۸	۱۲	۲/۳۱	۴/۰	۶/۰	۳۱/۹	۲۵۳	۲۰۳	۱۲/۵	۰/۷۱۷۲۶	۲۷	۰/۵۴۱-۰/۰۸۳	
F	۱/۸	۱۲	۲/۱۹	۴/۰	۵/۹	۳۰/۹	۲۵۲	۲۰۲	۱۲/۹	۰/۷۱۵۳۷	۲۷	۰/۵۴۳-۰/۰۸۳	
G	۱/۷	۱۲	۱/۸۱	۳/۰	۵/۶	۳۰/۶	۲۵۱	۱۹۳	۱۴/۶	۰/۷۰۳۵۴	۲۸	۰/۵۵۱-۰/۰۸۷	
H	۲/۱	۱۱	۱/۱۹	۲/۳	۱۲	۲۴/۶	۲۸۸	۱۸۰	۱۴/۹	۰/۵۹۰۸۱	۳۲	۰/۴۹۵-۰/۰۹۵	
I	۱/۷	۱۲	۱/۷۷	۲/۹	۵/۸	۲۲/۶	۲۵۸	۱۹۸	۲۳/۱	۰/۶۹۳۴۴	۲۸	۰/۵۳۵-۰/۰۸۶	
J	۱/۲	۱۴	۱/۳۰	۲/۲	۶/۰	۱۶/۴	۲۳۵	۱۵۴	۱۰/۸	۰/۵۹۹۰۷	۳۲	۰/۶۰۰-۰/۱۱۴	
K	۱/۶	۱۴	۱/۹۷	۴/۳	۴/۷	۲۷/۴	۲۳۲	۱۶۷	۱۲/۲	۰/۶۷۵۷۵	۲۹	۰/۶۰۵-۰/۱۰۰	
B3PW91													
A	۵/۱	۱۵	۰/۳۱	۳/۳	۷/۰	۹۱/۰	۱۶۲	۱۱۹	۴۶/۱	۰/۸۶۲۹۵	۱۹	۰/۸۱۸-۰/۰۸۳	
B	۳/۱	۱۴	۰/۹۱	۵/۰	۵/۴	۷۴/۲	۱۳۶	۱۵۷	۴۴/۱	۰/۹۸۶۹۳	۶	۰/۸۵۰-۰/۰۲۶	
C	۴/۱	۱۵	۰/۸۹	۴/۷	۵/۱	۶۹/۵	۱۳۹	۱۵۸	۴۰/۸	۰/۹۸۰۷۵	۷	۰/۸۴۷-۰/۰۳۱	
D	۳/۱	۱۵	۱/۳۵	۶/۶	۳/۹	۶۹/۰	۱۵۸	۱۸۱	۴۶/۴	۰/۹۷۳۷۶	۸	۰/۷۴۹-۰/۰۳۲	
E	۶/۱	۱۳	۱/۵۸	۶/۱	۳/۲	۶۷/۶	۱۶۰	۲۱۱	۴۰/۱	۰/۹۶۲۳۹	۱۰	۰/۶۸۸-۰/۰۳۶	
F	۶/۱	۱۴	۱/۵۶	۶/۲	۳/۳	۶۶/۹	۱۶۰	۲۱۰	۴۱/۰	۰/۹۶۳۴۱	۱۰	۰/۶۹۰-۰/۰۳۵	
G	۶/۱	۱۴	۱/۲۹	۴/۹	۳/۲	۶۵/۸	۱۶۰	۲۰۰	۴۰/۹	۰/۹۶۳۹۹	۱۰	۰/۷۱۰-۰/۰۳۶	
H	۷/۱	۱۳	۰/۸۶	۳/۶	۵/۹	۶۳/۳	۱۸۶	۱۹۴	۴۸/۰	۰/۹۳۷۷۳	۱۳	۰/۶۷۳-۰/۰۴۵	
I	۵/۱	۱۴	۱/۱۲	۴/۳	۲/۹	۵۷/۴	۱۶۶	۲۰۵	۵۸/۰	۰/۹۵۸۵۵	۱۰	۰/۶۸۷-۰/۰۳۷	
J	۲/۱	۱۵	۱/۱۹	۵/۰	۴/۵	۵۸/۳	۱۵۰	۱۷۳	۳۴/۶	۰/۹۵۵۴۹	۱۱	۰/۷۹۳-۰/۰۴۵	
K	۶/۱	۱۵	۱/۷۱	۷/۴	۳/۳	۶۷/۶	۱۴۲	۱۸۰	۳۹/۱	۰/۹۷۹۲۹	۷	۰/۷۸۷-۰/۰۳۰	
MP2													
A	۰/۸	۱۵	۰/۵۱	۰/۰	۲/۰	۸۰/۳	۱۱۷	۳۴	۵۷/۲	۰/۴۲۷۷۸	۳۸	۱/۰۰۵-۰/۲۴۳	
B	۱/۰	۱۶	۰/۷۹	۳/۶	۳/۱	۶۱/۰	۱۲۹	۹۰	۳۲/۳	۰/۸۴۱۷۹	۲۰	۱/۰۶۴-۰/۱۱۷	
C	۰/۸	۱۶	۰/۸۸	۴/۳	۲/۰	۶۱/۰	۱۱۱	۸۹	۳۸/۳	۰/۹۰۳۹۵	۱۶	۱/۱۶۹-۰/۰۹۸	
D	۰/۶	۱۵	۱/۵۰	۶/۰	۱/۴	۵۹/۸	۱۳۳	۱۰۷	۴۲/۷	۰/۹۰۳۳۰	۱۶	۱/۰۰۴-۰/۰۸۵	
E	۰/۹	۱۳	۱/۷۱	۵/۵	۰/۹	۵۸/۳	۱۳۳	۱۳۴	۳۷/۰	۰/۹۵۸۷۴	۱۰	۰/۹۴۳-۰/۰۵۱	
F	۰/۹	۱۴	۱/۶۷	۵/۵	۰/۹	۵۷/۸	۱۳۳	۱۳۴	۳۷/۷	۰/۹۵۸۲۳	۱۰	۰/۹۴۵-۰/۰۵۲	
G	۱/۰	۱۵	۱/۲۰	۴/۷	۰/۶	۵۶/۲	۱۳۰	۱۲۲	۳۹/۸	۹۴۵۵۳	۱۲	۰/۹۹۱-۰/۰۶۲	
H	۰/۹	۱۵	۱/۱۰	۴/۷	۲/۵	۶۰/۸	۱۴۱	۱۲۲	۴۳/۹	۰/۹۲۴۹۵	۱۴	۰/۹۳۷-۰/۰۶۹	
I	۰/۸	۱۴	۱/۳۰	۵/۱	۰/۶	۵۲/۴	۱۲۵	۱۲۸	۵۶/۵	۰/۹۵۷۴۲	۱۰	۰/۹۷۵-۰/۰۵۴	
J	۰/۶	۱۵	۱/۳۳	۴/۳	۲/۱	۵۱/۹	۱۳۲	۱۰۳	۳۶/۰	۰/۸۸۴۱۴	۱۷	۱/۰۳۷-۰/۰۹۶	

ادامه جدول ۲.

Levels/basis sets	Frequency range (cm ⁻¹)										R ²	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp/ ^δ	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
HF													
D	۳/۱	۲۵	۰/۱۱	۳/۸	۳/۰	۷۵/۰	۱۱۳	۲۵۵	۹۳/۰	۰/۹۰۱۹۵	۱۶	۰/۶۱۴-۰/۰۵۲	
B	۴/۱	۲۶	۰/۰۳	۲/۷	۳/۰	۷۷/۰	۱۰۰	۲۳۰	۸۱/۰	۰/۹۰۹۲۴	۱۵	۰/۶۷۹-۰/۰۵۵	
MP3													
D	۸/۰	۱۹	۰/۷۰	۳/۴	۰/۹	۶۴/۶	۱۱۷	۱۴۷	۵۳/۷	۰/۹۹۴۴۲	۴	۰/۹۲۹-۰/۰۱۸	
B	۱/۰	۲۰	۰/۴۰	۲/۴	۱/۴	۶۴/۹	۹۹	۱۲۶	۴۸/۶	۰/۹۹۲۵۵	۴	۱/۰۶۲-۰/۰۲۴	

C و همچنین زوایای CCC و CCO را با خطای کمتر از ۱٪ در مقایسه با مقادیر تجربی در اختیار می گذارند. برای اندازه طول پیوند C=O، روش G96LYP با توابع پایه 6-311+G** و 6-311++G** بهترین نتیجه را می دهند. در حالی که B3P86 با تابع پایه cc-pVTZ دقیقاً اندازه طول پیوند C-C را در اختیار می گذارد.

توابع پایه و سطوح به کار گرفته شده نتوانستند اندازه طول پیوند C-H را با دقت خوبی محاسبه کنند. ولی اکثر سطوح و توابع پایه به کار گرفته شده مقدار زاویه C-C-O را با دقت خوبی محاسبه می کنند. همچنین این جدول نشان می دهد که زاویه C-C-C نیز با دقت خوبی توسط روشهای به کار گرفته شده باز تولید شد. در (جدول-۳) کارآیی روش DFT در پیش بینی ممان دوقطبی استون نیز آورده شده است. مقادیر ممان دوقطبی محاسبه شده به طور کلی توافق خوبی با مقادیر تجربی دارد.

همان طور که در (جدول-۲) دیده می شود نتایج به دست آمده از سطوح محاسباتی B3P86، B3PW91 و B972 با تابع پایه 6-31G* بهترین مقدار را برای R² به ما می دهد. روند به صورت زیر است:
6-31G* > 6-31G** > cc-pVTZ > 6-311G** > 6-311++G** > 6-31++G** > 6-311+G** > D95+++ > cc-pVDZ > D95** > 6-31G
در مورد سطح BP86 بهترین نتیجه با استفاده از تابع پایه cc-pVTZ به دست آمد. همان طور که در (جدول-۲) نشان داده شده است، نتایج به دست آمده با استفاده از سطح SVWN5 در توافق با مقادیر تجربی نیست. همچنین (جدول-۲) نشان می دهد که نتایج محاسبه شده با استفاده از سطوح DFT بسیار بهتر از نتایج محاسبه شده با استفاده از روشهای HF و MP2 است.

۳-۳ ساختار هندسی

مهمترین مشخصه های ساختاری به دست آمده با استفاده از روشهای نظری و تجربی در (جدول-۳) نشان داده شده اند. بسیاری از روشهای نظری اندازه طول پیوندهای C=O و C-

جدول ۳- مقادیر طول پیوند، زوایای پیوندی و ممان دوقطبی تجربی و نظری استون^a.

	C=O (Å)	C-C (Å)	C-H (Å)	<CCO	<CCC	μ (Debye)
Exp ²⁴	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
B3LYP						
A	۱/۲۴۱	۱/۵۱۵	۱/۰۹۱-۱/۰۹۸	۱۲۱/۵	۱۱۷/۰	۳/۲
B	۱/۲۱۶	۱/۵۲۰	۱/۰۹۲-۱/۰۹۸	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۲/۸
C	۱/۲۱۶	۱/۵۲۰	۱/۰۹۱-۱/۰۹۶	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۲/۸
D	۱/۲۰۹	۱/۵۱۹	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۸
E	۱/۲۱۱	۱/۵۱۷	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
F	۱/۲۱۲	۱/۵۱۷	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
G	۱/۲۱۹	۱/۵۱۸	۱/۰۹۱-۱/۰۹۷	۱۲۱/۶	۱۱۶/۹	۳/۲

ادامه جدول ۳.

	C=O (Å)	C-C (Å)	C-H (Å)	<CCO	<CCC	μ (Debye)
Exp ²⁴	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
H	۱/۲۲۱	۱/۵۲۳	۱/۰۹۲-۱/۰۹۸	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۳/۰
I	۱/۲۲۱	۱/۵۲۳	۱/۰۹۲-۱/۰۹۸	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۲
J	۱/۲۱۴	۱/۵۱۹	۱/۰۹۸-۱/۱۰۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۷
K	۱/۲۰۹	۱/۵۱۴	۱/۰۸۷-۱/۰۹۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۲/۹
B972						
A	۱/۲۳۹	۱/۵۱۰	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۵	۱۱۷/۰	۳/۲
B	۱/۲۱۲	۱/۵۱۶	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
C	۱/۲۱۲	۱/۵۱۵	۱/۰۸۹-۱/۰۹۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
D	۱/۲۰۷	۱/۵۱۴	۱/۰۸۸-۱/۰۹۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
E	۱/۲۰۸	۱/۵۱۲	۱/۰۸۷-۱/۰۹۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
F	۱/۲۰۸	۱/۵۱۲	۱/۰۸۷-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
G	۱/۲۱۵	۱/۵۱۳	۱/۰۸۹-۱/۰۹۴	۱۲۱/۷	۱۱۶/۷	۳/۲
H	۱/۲۱۶	۱/۵۱۷	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۳/۰
I	۱/۲۱۶	۱/۵۱۷	۱/۰۹۰-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
J	۱/۲۱۱	۱/۵۱۳	۱/۰۹۵-۱/۱۰۰	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۸
K	۱/۲۰۶	۱/۵۱۱	۱/۰۸۵-۱/۰۹۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
BLYP						
A	۱/۲۵۴	۱/۵۲۹	۱/۰۹۹-۱/۱۰۶	۱۲۱/۶	۱۱۶/۹	۳/۰
B	۱/۲۲۸	۱/۵۲۳	۱/۰۹۸-۱/۱۰۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
C	۱/۲۲۸	۱/۵۲۲	۱/۰۹۷-۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
D	۱/۲۲۱	۱/۵۲۲	۱/۰۹۵-۱/۱۰۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۷
E	۱/۲۲۴	۱/۵۲۰	۱/۰۹۶-۱/۱۰۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
F	۱/۲۲۴	۱/۵۲۱	۱/۰۹۶-۱/۱۰۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
G	۱/۲۳۲	۱/۵۲۱	۱/۰۹۸-۱/۱۰۴	۱۲۱/۶	۱۱۶/۸	۳/۱
H	۱/۲۳۳	۱/۵۲۶	۱/۰۹۹-۱/۱۰۵	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۲/۹
I	۱/۲۳۴	۱/۵۲۶	۱/۰۱۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
J	۱/۲۲۶	۱/۵۲۲	۱/۱۰۵-۱/۱۱۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۶
K	۱/۲۲۱	۱/۵۲۷	۱/۰۹۳-۱/۰۹۹	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۲/۸
G96LYP						
A	۱/۲۵۳	۱/۵۲۹	۱/۰۹۸-۱/۱۰۵	۱۲۱/۵	۱۱۶/۹	۳/۱
B	۱/۲۲۷	۱/۵۲۳	۱/۰۹۸-۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
C	۱/۲۲۷	۱/۵۲۲	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۲/۷
D	۱/۲۲۰	۱/۵۲۱	۱/۰۹۵-۱/۱۰۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۸
E	۱/۲۲۲	۱/۵۲۹	۱/۰۹۵-۱/۱۰۱	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
F	۱/۲۲۲	۱/۵۲۹	۱/۰۹۵-۱/۱۰۱	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
G	۱/۲۳۰	۱/۵۲۰	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۶	۱۱۶/۹	۳/۱
H	۱/۲۳۲	۱/۵۲۵	۱/۰۹۸-۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۹
I	۱/۲۳۲	۱/۵۲۵	۱/۰۹۹-۱/۱۰۴	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
J	۱/۲۲۵	۱/۵۲۱	۱/۱۰۴-۱/۱۱۰	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۶
K	۱/۲۲۰	۱/۵۲۶	۱/۰۹۲-۱/۰۹۸	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۲/۹

ادامه جدول ۳.

	C=O (Å)	C-C (Å)	C-H (Å)	<CCO	<CCC	μ (Debye)
Exp ²⁴	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
BP86						
A	۱/۲۵۳	۱/۵۲۳	۱/۱۰۰-۱/۱۰۷	۱۲۱/۶	۱۱۶/۸	۳/۱
B	۱/۲۲۶	۱/۵۲۷	۱/۱۰۰-۱/۱۰۸	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۲/۷
C	۱/۲۲۷	۱/۵۲۶	۱/۰۹۹-۱/۱۰۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۸
D	۱/۲۲۰	۱/۵۲۵	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۲/۸
E	۱/۲۲۳	۱/۵۲۳	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۱
F	۱/۲۲۳	۱/۵۲۳	۱/۰۹۸-۱/۱۰۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۱
G	۱/۲۳۰	۱/۵۲۴	۱/۰۹۹-۱/۱۰۵	۱۲۱/۷	۱۱۶/۷	۳/۱
H	۱/۲۳۱	۱/۵۲۹	۱/۱۰۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۳/۰
I	۱/۲۳۲	۱/۵۲۸	۱/۱۰۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۱
J	۱/۲۲۶	۱/۵۲۵	۱/۱۰۶-۱/۱۱۲	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۷
K	۱/۲۲۱	۱/۵۲۰	۱/۰۹۵-۱/۱۰۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
B3P86						
A	۱/۲۳۹	۱/۵۰۸	۱/۰۹۱-۱/۰۹۷	۱۲۱/۵	۱۱۶/۹	۳/۲
B	۱/۲۱۴	۱/۵۱۳	۱/۰۹۱-۱/۰۹۷	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
C	۱/۲۱۴	۱/۵۱۲	۱/۰۹۰-۱/۰۹۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
D	۱/۲۰۷	۱/۵۱۱	۱/۰۸۹-۱/۰۹۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۹
E	۱/۲۰۹	۱/۵۰۹	۱/۰۸۹-۱/۰۹۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۲
F	۱/۲۰۹	۱/۵۰۹	۱/۰۸۹-۱/۰۹۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۱
G	۱/۲۱۶	۱/۵۱۰	۱/۰۹۰-۱/۰۹۶	۱۲۱/۷	۱۱۶/۷	۳/۲
H	۱/۲۱۸	۱/۵۱۵	۱/۰۹۱-۱/۰۹۶	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۳/۰
I	۱/۲۱۸	۱/۵۱۵	۱/۰۹۱-۱/۰۹۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۲
J	۱/۲۱۲	۱/۵۱۱	۱/۰۹۷-۱/۱۰۲	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۸
K	۱/۲۰۷	۱/۵۰۷	۱/۰۸۷-۱/۰۹۲	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۰
SVWN5						
A	۱/۲۴۲	۱/۴۹۸	۱/۱۰۲-۱/۱۰۸	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۲
B	۱/۲۱۸	۱/۵۰۳	۱/۱۰۱-۱/۱۰۷	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۲/۸
C	۱/۲۱۸	۱/۵۰۲	۱/۱۰۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۲/۸
D	۱/۲۱۱	۱/۴۹۹	۱/۰۹۹-۱/۱۰۵	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۲/۹
E	۱/۲۱۳	۱/۴۹۷	۱/۰۱۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۳/۲
F	۱/۲۱۳	۱/۴۹۷	۱/۰۱۰-۱/۱۰۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۳/۲
G	۱/۲۲۱	۱/۵۰۰	۱/۱۰۱-۱/۱۰۸	۱۲۱/۷	۱۱۶/۷	۳/۲
H	۱/۲۲۲	۱/۵۰۴	۱/۱۰۲-۱/۱۰۸	۱۲۲/۰	۱۱۶/۰	۳/۰
I	۱/۲۲۳	۱/۵۰۴	۱/۱۰۲-۱/۱۰۹	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۳/۲
J	۱/۲۱۷	۱/۵۰۱	۱/۱۰۸-۱/۱۱۳	۱۱۶/۳	۱۱۶/۳	۲/۷
K	۱/۲۱۱	۱/۴۹۵	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۳/۰
B3PW91						
A	۱/۲۴۰	۱/۵۱۱	۱/۰۹۱-۱/۰۹۷	۱۲۱/۵	۱۱۷/۰	۳/۲
B	۱/۲۱۴	۱/۵۱۶	۱/۰۹۲-۱/۰۹۷	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
C	۱/۲۱۴	۱/۵۱۵	۱/۰۹۰-۱/۰۹۶	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۹

ادامه جدول ۳.

	C=O (Å)	C-C (Å)	C-H (Å)	<CCO	<CCC	μ (Debye)
Exp ²⁴	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
D	۱/۲۰۸	۱/۵۱۴	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
E	۱/۲۱۰	۱/۵۱۲	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
F	۱/۲۱۰	۱/۵۱۲	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
G	۱/۲۱۷	۱/۵۱۳	۱/۰۹۱-۱/۰۹۶	۱۲۱/۷	۱۱۶/۷	۳/۲
H	۱/۲۱۸	۱/۵۱۸	۱/۰۹۲-۱/۰۹۷	۱۲۱/۹	۱۱۶/۳	۳/۰
I	۱/۲۱۸	۱/۵۱۷	۱/۰۹۲-۱/۰۹۷	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۳/۱
J	۱/۲۱۳	۱/۵۱۴	۱/۰۹۷-۱/۱۰۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۸
K	۱/۲۰۸	۱/۵۱۰	۱/۰۸۷-۱/۰۹۳	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۹
MP2						
A	۱/۲۶۴	۱/۵۲۳	۱/۰۹۶-۱/۰۲۰	۱۲۱/۳	۱۱۷/۳	۳/۸
B	۱/۲۲۸	۱/۵۱۳	۱/۰۹۰-۱/۰۹۵	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۳
C	۱/۲۲۷	۱/۵۱۳	۱/۰۸۶-۱/۰۹۰	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۳
D	۱/۲۱۷	۱/۵۱۷	۱/۰۹۰-۱/۰۹۵	۱۲۲/۰	۱۱۶/۰	۳/۳
E	۱/۲۲۰	۱/۵۱۶	۱/۰۹۰-۱/۰۹۶	۱۲۲/۰	۱۱۶/۱	۳/۶
F	۱/۲۲۰	۱/۵۱۶	۱/۰۹۰-۱/۰۹۶	۱۲۲/۰	۱۱۶/۱	۳/۵
G	۱/۲۳۱	۱/۵۱۱	۱/۰۸۸-۱/۰۹۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۶
H	۱/۲۳۱	۱/۵۱۸	۱/۰۸۷-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۳/۵
I	۱/۲۳۱	۱/۵۱۸	۱/۰۸۹-۱/۰۹۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۶
J	۱/۲۲۳	۱/۵۲۰	۱/۰۹۹-۱/۱۰۳	۱۲۲/۰	۱۱۶/۰	۳/۲
HF						
D	۱/۲۱۷	۱/۵۱۳	۱/۰۸۲-۱/۰۹۳	۱۲۱/۷	۱۱۶/۴	۳/۱
B	۱/۲۴۷	۱/۵۱۲	۱/۰۸۴-۱/۰۹۷	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۸
MP3						
D	۱/۲۱۴	۱/۵۱۶	۱/۰۸۶-۱/۰۸۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۶
B	۱/۲۱۳	۱/۵۱۲	۱/۰۸۴-۱/۰۸۰	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۳/۱

۴. نتیجه گیری

با استفاده از چندین روش مبتنی بر نظریه تابعی چگال و روشهای *ab initio* خواص مولکولی استون شامل فرکانسها، شدتهای مادون قرمز، و دادههای ساختاری محاسبه شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که روشهای تابعی چگال می‌توانند مقادیر تجربی را با دقت خیلی خوبی باز تولید کنند. اضافه بر آن مشاهده می‌شود که توابع پایه و سطوح محاسباتی مختلف در پیش بینی خواص مولکولی متفاوت یکسان عمل نمی‌کنند ولی به هر حال نسبت به دیگر روشهای کوانتومی کار آئی به مراتب بهتری دارند.

۵. مراجع

- [1] B. Paulus, *Physics Reports.*, 428 (2006) 1.
- [2] M.A.V.R. da Silva, J.I.T.A. Cabral and P. Gomes, J.R.B. Gomes, *J. Org. Chem.*, 71 (2006) 3677.
- [3] J.C. Decius, *J. Mol. Spectroscopy.*, 57 (1975) 348.
- [4] M. Gussoni, C. Castiglioni and G. Zerbi, *J. Phys. Chem.*, 88 (1984) 600.
- [5] J.D. Rogers, B. Rub, S. Goldman and W.B. Person, *J. Phys. Chem.*, 85 (1981) 3727.
- [6] S. Kondo and Y. Koga, *J. Chem. Phys.*, 69 (1978) 4022.
- [7] S. Kondo, S. Saeki, *Spectrochim. Acta. A.*, 29 (1973) 735.

- Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, V.G. Zakrzewski, S. Dapprich, A.D. Daniels, M.C. Strain, O. Farkas, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, Q. Cui, A.G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, C. Gonzalez, and J.A. Pople, Gaussian 03, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2004).
- [16] A.D. Becke, *Phys. Rev. A.*, 38 (1988) 3098.
- [17] A.D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 98 (1993) 5648.
- [18] P.M.W. Gill, *Mol. Phys.*, 89 (1996) 433.
- [19] J.P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B.*, 45 (1992) 13244.
- [20] C. Lee, W. Yang and R.G. Parr, *Phys. Rev. B.*, 37 (1988) 785.
- [21] J.P. Perdew, *Phys. Rev. B.*, 33 (1986) 8822.
- [22] A.D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 107 (1997) 8554.
- [23] P.J. Wilson, T.J. Bradley and D.J. Tozer, *J. Chem. Phys.*, 115 (2001) 9233.
- [24] N.L. Allinger, K. Chen, M. Rahman and A. Pathiaseril, *J. Am. Chem. Soc.*, 113 (1991) 4505.
- [8] E.E. Zvereva, A.R. Shagidullin, S.A. Katsyuba, *J. Phys. Chem. A.*, 115 (2011) 63.
- [9] W. Schindler, J. Jonas, *J. Chem. Phys. Lett.*, 67 (1979) 428.
- [10] X. Xing, R. McDiarmid, J.G. Philis and L. Goodman, *J. Chem. Phys.*, 99 (1993) 7565.
- [11] P. Cossee and J.H. Schachtschneider, *J. Chem. Phys.*, 44 (1966) 97.
- [12] A. Bolovinos, P. Tsekeris, J. Philis, E. Pantos and G. Andritsopoulos, *J. Mol. Spectroscopy.*, 103 (1984) 240.
- [13] Y.G. Smeyers, M.L. Senent and V. Botella, *J. Chem. Phys.*, 98 (1993) 2754.
- [14] C. Angeli, S. Borini, L. Ferrighi and R. Cimiraglia, *THEOCHEM.*, 718 (2005) 55.
- [15] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, J.A. Montgomery, T. Vreven, K.N. Kudin, J.C. Burant, J.M. Millam, S.S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J.E. Knox, H.P. Hratchian, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, P.Y. Ayala, K. Morokuma, G.A.

