



## کارآیی روش‌های نظریه تابع چگال در محاسبه خواص مولکولی استون

سید فرامرز طیاری<sup>۱\*</sup>، منصوره زاهدی تبریزی<sup>۲</sup>، حسین عزیزی توپکانلو<sup>۳</sup>، فرناز نقوی<sup>۴</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه آزاد اسلامی، واحد نیشابور، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، نیشابور، ایران

<sup>۲</sup> دانشگاه الزهراء، گروه شیمی

<sup>۳</sup> دانشگاه فردوسی مشهد، گروه شیمی

<sup>۴</sup> 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 استون 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 دو تایی-زتا با توابع قطبیده D95\*\* و همچنین با توابع نفوذی D95++\*\*

پ) توابع همبستگی دو تایی و سه تایی 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 اسیدیته 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  $\text{CH}_3$  را مشاهده کنند. فلیس و همکاران [۱۲] با استفاده از تکنیک یونش چند فوتونی تشدید دوفوتونی فرابنفش، بسامد  $\nu_{12}$  (شیوه  $A_2$  مربوط به پیچش گروه  $\text{CH}_3$ ) را برابر  $77 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  به دست آوردند. اسمیرز و همکاران [۱۳] هر دو تا شیوه ارتعاشی گروه  $\text{CH}_3$ ،  $\nu_{17}$  و  $\nu_{12}$  را با دقت بیشتر به ترتیب در  $77$  و  $125 \text{ cm}^{-1}$  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 ( $\alpha$ ) 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 ( $\alpha$ )، 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 ( $\beta$ ) 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<sup>۳</sup>.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> پایین					۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> بالایی					کل فرکانسها							
	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۲	روش ۱	روش ۲			
	R <sup>2</sup>	SD	α	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	β	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	
<b>B3LYP</b>																		
A	۰/۹۹۷۹۸	۲۲	۰/۹۶۰	۵	۰/۹۵۶	۰/۹۱۴۲۹	۱۲	۰/۹۵۷	۳	۰/۷۴۳	۰/۹۹۹۶۰	۳	۶۶۳	۰/۷۴۳	۰/۹۹۹۵۷	۲۰	۰/۹۵۸	
B	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۰/۹۶۶	۲۲	۰/۹۴۸	۰/۹۶۸۳۲	۱۰	۰/۹۵۷	۳	۰/۷۸۶	۰/۹۹۵۳۷	۳	۵۳۱	۰/۷۸۶	۰/۹۹۹۷۵	۱۵	۰/۹۶۰	
C	۰/۹۹۹۰۲	۱۶	۰/۹۷۴	۲۲	۰/۹۵۷	۰/۹۶۵۸۸	۱۱	۰/۹۵۸	۳	۰/۷۶۸	۰/۹۹۹۶۹	۳	۵۸۹	۰/۷۶۸	۰/۹۹۹۵۹	۲۰	۰/۹۶۲	
D	۰/۹۹۹۲۴	۱۴	۰/۹۸۱	۱۷	۰/۹۶۸	۰/۹۶۸۵۹	۷	۰/۹۶۴	۳	۰/۸۲۸	۰/۹۹۵۶۵	۳	۴۱۹	۰/۸۲۸	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۶۹	
E	۰/۹۹۹۶۳	۱۰	۰/۹۸۳	۱۳	۰/۹۷۲	۰/۹۷۱۵۰	۷	۰/۹۶۴	۳	۰/۸۳۵	۰/۹۹۵۲۴	۳	۳۹۸	۰/۸۳۵	۰/۹۹۹۶۷	۱۸	۰/۹۶۹	
F	۰/۹۹۹۶۴	۹	۰/۹۸۳	۱۳	۰/۹۷۲	۰/۹۷۱۵۰	۷	۰/۹۶۴	۳	۰/۸۳۵	۰/۹۹۵۲۴	۳	۳۹۸	۰/۸۳۵	۰/۹۹۹۶۸	۱۸	۰/۹۶۹	
G	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۰/۹۷۹	۲۴	۰/۹۶۰	۰/۹۶۶۶۱	۱۰	۰/۹۵۹	۳	۰/۷۸۴	۰/۹۹۹۵۳	۳	۵۴۴	۰/۷۸۴	۰/۹۹۹۵۲	۲۱	۰/۹۶۵	
H	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۰/۹۸۲	۱۲	۰/۹۷۳	۰/۹۶۱۱۷	۱۲	۰/۹۵۶	۳	۰/۷۵۱	۰/۹۹۴۸۸	۳	۶۳۶	۰/۷۵۱	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۳	
I	۰/۹۹۹۵۶	۱۰	۰/۹۸۴	۱۳	۰/۹۷۴	۰/۹۶۷۵۹	۱۱	۰/۹۵۸	۳	۰/۷۶۰	۰/۹۹۴۸۵	۳	۶۱۴	۰/۷۶۰	۰/۹۹۹۳۸	۲۴	۰/۹۶۵	
J	۰/۹۹۸۳۲	۲۰	۰/۹۹۳	۱۵	۰/۹۸۱	۰/۹۶۹۹۵	۱۱	۰/۹۶۱	۳	۰/۷۶۴	۰/۹۹۶۰۸	۳	۶۰۹	۰/۷۶۴	۰/۹۹۸۹۴	۳۲	۰/۹۷۰	
K	۰/۹۹۹۲۶	۱۴	۰/۹۸۱	۱۹	۰/۹۶۶	۰/۹۷۷۰۸	۶	۰/۹۶۴	۳	۰/۸۵۰	۰/۹۹۴۹۴	۳	۳۵۱	۰/۸۵۰	۰/۹۹۹۶۴	۱۸	۰/۹۶۹	
<b>B972</b>																		
A	۰/۹۹۸۲۲	۲۱	۰/۹۳۵	۱۱	۰/۹۶۵	۰/۸۴۶۶۱	۱۷	۰/۹۶۶	۴	۰/۶۸۱	۰/۹۹۳۱۳	۴	۸۳۱	۰/۶۸۱	۰/۹۹۹۵۵	۲۱	۰/۹۸۴	
B	۰/۹۹۸۶۸	۱۸	۰/۹۶۱	۲۹	۰/۹۲۹	۰/۹۰۶۸۵	۱۳	۰/۹۶۷	۳	۰/۷۶۹	۰/۹۹۵۸۸	۳	۶۸۵	۰/۷۶۹	۰/۹۹۹۵۴	۲۱	۰/۹۵۱	
C	۰/۹۹۸۵۳	۱۹	۰/۹۷۰	۲۶	۰/۹۴۹	۰/۸۸۴۸۴	۱۴	۰/۹۶۷	۴	۰/۷۱۲	۰/۹۹۲۵۸	۴	۷۳۷	۰/۷۱۲	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۳	
D	۰/۹۹۸۷۲	۱۸	۰/۹۷۷	۲۲	۰/۹۵۹	۰/۹۶۵۵۲	۱۱	۰/۹۵۳	۴	۰/۷۵۹	۰/۹۹۳۸۰	۴	۶۰۳	۰/۷۵۹	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۹	
E	۰/۹۹۹۳۹	۱۲	۰/۹۷۸	۱۶	۰/۹۶۵	۰/۹۶۷۴۱	۱۱	۰/۹۵۳	۴	۰/۷۵۷	۰/۹۹۴۳۳	۴	۶۱۲	۰/۷۵۷	۰/۹۹۹۳۸	۲۴	۰/۹۶۰	
F	۰/۹۹۹۳۰	۱۳	۰/۹۷۸	۱۸	۰/۹۶۴	۰/۹۶۹۷۳	۱۱	۰/۹۵۳	۴	۰/۷۶۰	۰/۹۹۴۰۲	۴	۶۰۳	۰/۷۶۰	۰/۹۹۹۳۶	۲۵	۰/۹۶۰	
G	۰/۹۹۹۱۵	۱۴	۰/۹۷۴	۲۲	۰/۹۵۷	۰/۸۸۸۱۸	۱۴	۰/۹۶۸	۴	۰/۷۱۵	۰/۹۹۳۲۰	۴	۷۳۰	۰/۷۱۵	۰/۹۹۹۲۷	۲۶	۰/۹۵۵	
H	۰/۹۹۹۰۳	۱۵	۰/۹۷۶	۱۶	۰/۹۶۳	۰/۸۵۱۸۵	۱۶	۰/۹۶۴	۶	۰/۶۹۰	۰/۹۸۴۷۸	۶	۷۹۸	۰/۶۹۰	۰/۹۹۸۹۷	۳۱	۰/۹۵۳	
I	۰/۹۹۹۲۱	۱۴	۰/۹۷۸	۱۶	۰/۹۶۵	۰/۸۵۶۰۹	۱۶	۰/۹۶۵	۶	۰/۶۹۴	۰/۹۸۵۵۹	۶	۷۹۱	۰/۶۹۴	۰/۹۹۹۰۲	۳۱	۰/۹۵۴	
J	۰/۹۹۷۶۴	۲۴	۰/۹۸۶	۱۹	۰/۹۷۱	۰/۸۵۰۲۶	۱۶	۰/۹۶۸	۳	۰/۸۰۸	۰/۹۸۷۹۵	۳	۸۰۸	۰/۸۰۸	۰/۹۹۸۴۴	۳۹	۰/۹۵۹	
K	۰/۹۹۸۸۶	۱۷	۰/۹۷۸	۲۱	۰/۹۶۱	۰/۹۶۵۳۳	۱۰	۰/۹۵۴	۳	۰/۷۷۹	۰/۹۹۵۱۱	۳	۵۴۳	۰/۷۷۹	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۱	
<b>BLYP</b>																		
A	۰/۹۹۶۵۰	۲۹	۰/۹۹۰	۷	۰/۹۸۷	۰/۸۰۴۸۱	۱۴	۰/۹۸۲	۳	۰/۷۴۷	۰/۹۹۴۸۱	۳	۷۷۷	۰/۷۴۷	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۸۵	
B	۰/۹۹۸۹۲	۱۶	۱/۰۰۶	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۶۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۴	۰/۷۱۸	۰/۹۹۴۷۸	۴	۶۱۸	۰/۷۱۸	۰/۹۹۹۳۹	۲۴	۰/۹۹۰	
C	۰/۹۹۸۹۵	۱۶	۱/۰۰۶	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۶۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۴	۰/۷۱۸	۰/۹۹۴۷۸	۴	۶۱۸	۰/۷۱۸	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۰	
D	۰/۹۹۸۶۱	۱۹	۱/۰۱۴	۲۵	۰/۹۹۳	۰/۹۶۴۴۲	۸	۰/۹۸۹	۴	۰/۶۲۵	۰/۹۹۲۰۲	۴	۴۲۵	۰/۶۲۵	۰/۹۹۹۳۰	۲۶	۰/۹۹۶	

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> پایین										۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> بالای										کل فرکانسها							
	روش ۱					روش ۲					روش ۱					روش ۲					روش ۱							
	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	S	D	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	
E	.۹۹۹۱۴	۱۵	۱/۰.۱۵	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۸	۱/۰.۰۰۰	.۹۹۹۳۷	۸	.۹۸۹	.۹۹۲۲۴	۴	۴۱۳	.۸۵۲	.۹۹۹۳۶	۲۵	.۹۹۷											
F	.۹۹۹۲۷	۱۳	۱/۰.۱۵	.۹۹۹۴۸	۱۲	۱۶	۱/۰.۰۲	.۹۹۹۶۷	۸	.۹۸۹	.۹۹۱۰۳	۴	۴۱۷	.۸۵۱	.۹۹۹۳۹	۲۴	.۹۹۷											
G	.۹۹۹۱۵	۱۴	۱/۰.۱۳	.۹۹۹۴۹	۱۲	۲۰	.۹۹۷	.۹۹۳۷۵	۱۱	.۹۸۵	.۹۹۴۱۶	۴	۵۱۳	.۸۹۵	.۹۹۹۷۸	۲۶	.۹۹۳											
H	.۹۹۹۳۳	۱۳	۱/۰.۱۷	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۱	۱/۰.۰۸	.۹۹۱۹۶	۱۲	.۹۸۱	.۹۹۶۶۰	۳	۶۶۶	.۸۶۸	.۹۹۸۹۸	۳۱	.۹۹۱											
I	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱/۰.۱۹	.۹۹۹۶۱	۱۰	۱۱	۱/۰.۱۰	.۹۹۱۴۲	۱۲	.۹۸۴	.۹۹۵۴۹	۳	۶۳۷	.۸۷۳	.۹۹۹۰۴	۳۰	.۹۹۴											
J	.۹۹۹۰۱	۱۶	۱/۰.۲۷	.۹۹۹۱۴	۱۵	۱۲	۱/۰.۱۷	.۹۹۲۱۳	۱۲	.۹۸۸	.۹۹۵۴۰	۳	۶۳۷	.۸۷۶	.۹۹۸۷۴	۳۵	.۹۹۹											
K	.۹۹۹۱۱	۱۵	۱/۰.۱۳	.۹۹۹۴۱	۱۲	۱۹	.۹۹۷	.۹۹۶۸۹	۷	.۹۸۹	.۹۸۹۱۲	۵	۳۷۲	.۸۶۵	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۵											
<b>G96LYP</b>																												
A	.۹۹۹۶۵	۲۹	.۹۹۰	.۹۹۹۶۹	۳۰	۱۰	.۹۸۲	.۸۸۹۰۸	۱۴	.۹۸۱	.۹۹۵۲۰	۳	۷۳۲	.۸۴۰	.۹۹۹۲۲	۲۷	.۹۸۴											
B	.۹۹۸۳۴	۲۰	.۹۹۷	.۹۹۹۱۶	۱۵	۳۱	.۹۷۲	.۹۲۶۰۹	۱۱	.۹۸۲	.۹۹۲۲۰	۴	۵۷۱	.۸۹۴	.۹۹۹۵۱	۲۲	.۹۸۷											
C	.۹۹۸۲۳	۲۱	۱/۰.۰۵	.۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	.۹۷۹	.۹۲۹۲۰	۱۱	.۹۸۲	.۹۹۵۷۵	۳	۶۱۱	.۸۸۰	.۹۹۹۷۵	۲۷	.۹۸۸											
D	.۹۹۹۲۴	۱۴	۱/۰.۱۲	.۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	.۹۷۹	.۹۲۶۹۵	۸	.۹۸۷	.۹۹۴۳۱	۴	۴۴۸	.۸۳۸	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴											
E	.۹۹۹۳۶	۱۳	۱/۰.۱۳	.۹۹۹۴۳	۱۲	۱۵	۱/۰.۰۰	.۹۹۶۴۹	۸	.۹۸۷	.۹۹۳۶۸	۴	۴۳۹	.۸۴۱	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴											
F	.۹۹۹۳۷	۱۲	۱/۰.۱۳	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱۴	۱/۰.۰۲	.۹۹۶۴۰	۸	.۹۸۷	.۹۹۳۸۳	۴	۴۳۸	.۸۴۲	.۹۹۹۴۱	۲۴	.۹۹۴											
G	.۹۹۹۳۸	۱۲	۱/۰.۱۰	.۹۹۹۵۱	۱۱	۱۳	۱/۰.۰۲	.۹۹۳۷۹	۱۱	.۹۸۳	.۹۹۵۱۹	۳	۵۹۵	.۸۸۶	.۹۹۹۳۳	۲۵	.۹۹۱											
H	.۹۹۹۳۴	۱۳	۱/۰.۱۴	.۹۹۹۵۵	۱۱	۱۴	.۹۹۸	.۹۱۶۳۳	۱۲	.۹۸۰	.۹۹۵۶۷	۳	۶۵۵	.۸۶۴	.۹۹۹۰۲	۳۱	.۹۸۹											
I	.۹۹۹۴۴	۱۲	۱/۰.۱۶	.۹۹۹۵۲	۱۱	۱۵	۱/۰.۰۲	.۹۹۲۰۳	۱۲	.۹۸۲	.۹۹۵۵۱	۳	۶۶۱	.۸۷۰	.۹۹۹۰۵	۳۰	.۹۹۱											
J	.۹۹۸۳۷	۲۰	۱/۰.۲۵	.۹۹۹۶۳	۱۰	۱۵	۱/۰.۰۳	.۹۹۱۹۱	۱۲	.۹۸۶	.۹۹۶۶۴	۳	۶۶۸	.۸۷۱	.۹۹۸۶۳	۳۶	.۹۹۷											
K	.۹۹۹۱۹	۱۴	۱/۰.۱۱	.۹۹۸۸۱	۱۸	۲۳	۱/۰.۰۶	.۹۹۶۶۰	۷	.۹۸۷	.۹۹۱۴۹	۴	۳۸۵	.۸۵۹	.۹۹۹۴۰	۲۴	.۹۹۴											
<b>BP86</b>																												
A	.۹۹۷۷۴	۲۴	.۹۹۴	.۹۹۷۷۹	۲۴	۸	.۹۸۸	.۸۴۵۵۴	۱۷	.۹۷۹	.۹۹۷۰۴	۳	۸۳۴	.۸۰۵	.۹۹۹۳۵	۲۵	.۹۸۴											
B	.۹۹۸۸۵	۱۷	۱/۰.۰۲	.۹۹۹۴۰	۱۳	۲۵	.۹۸۱	.۹۱۸۶۵	۱۲	.۹۸۱	.۹۹۷۵۷	۲	۶۵۳	.۸۶۵	.۹۹۹۴۴	۲۳	.۹۸۷											
C	.۹۹۸۸۶	۱۷	۱/۰.۱۱	.۹۹۹۳۱	۱۳	۲۳	.۹۹۲	.۸۹۶۰۰	۱۴	.۹۸۰	.۹۹۶۷۸	۳	۷۱۷	.۸۴۴	.۹۹۹۰۹	۳۰	.۹۸۹											
D	.۹۹۹۲۶	۱۴	۱/۰.۱۹	.۹۹۹۳۷	۱۳	۱۲	۱/۰.۱۰	.۹۲۸۳۲	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۶۰	۳	۵۷۹	.۸۶۴	.۹۹۹۰۷	۳۰	.۹۹۵											
E	.۹۹۹۵۵	۱۱	۱/۰.۲۰	.۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰.۱۲	.۹۹۶۷۸	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	.۸۰۱	.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵											
F	.۹۹۹۵۶	۱۰	۱/۰.۲۰	.۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰.۱۲	.۹۹۶۷۸	۱۰	.۹۸۶	.۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	.۸۰۱	.۹۹۹۰۸	۳۰	.۹۹۵											
G	.۹۹۹۵۸	۱۰	۱/۰.۱۷	.۹۹۹۷۰	۹	۱۲	۱/۰.۰۷	.۸۹۷۲۹	۱۳	.۹۸۲	.۹۹۶۳۸	۳	۷۱۳	.۸۶۶	.۹۹۹۰۳	۳۰	.۹۹۱											
H	.۹۹۹۱۶	۱۴	۱/۰.۱۹	.۹۹۹۲۸	۱۴	۱۲	۱/۰.۰۹	.۸۷۶۶۷	۱۵	.۹۷۷	.۹۹۴۱۴	۴	۷۶۱	.۸۷۷	.۹۹۸۵۸	۳۷	.۹۸۹											
I	.۹۹۹۴۶	۱۲	۱/۰.۲۱	.۹۹۹۵۶	۱۱	۱۱	۱/۰.۱۲	.۸۸۲۱۴	۱۴	.۹۸۰	.۹۹۴۵۸	۳	۷۶۸	.۸۷۳	.۹۹۸۶۶	۳۶	.۹۹۱											

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> پائین												۲۰۰۰cm <sup>-1</sup> بالای												کل فرکانسها			
	روش ۱				روش ۲				روش ۱				روش ۲				روش ۱				روش ۲							
	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	α		
J	۰/۹۹۸۴۴	۲۰	۱/۰۲۰	۰/۹۹۸۵۸	۱۹	۱۳	۱/۰۲۰	۰/۸۶۹۰۰	۱۵	۰/۹۸۳	۰/۹۹۴۳۳	۳	۷۸۲	۰/۷۲۵	۰/۹۹۸۱۶	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۶	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۶	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۶	۴۲	۰/۹۹۶		
K	۰/۹۹۹۲۱	۱۴	۱/۰۲۰	۰/۹۹۹۵۱	۱۱	۱۹	۱/۰۰۴	۰/۹۴۷۴۲	۱۰	۰/۹۸۶	۰/۹۹۶۲۴	۳	۵۳۹	۰/۸۰۷	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۵		
<b>B3P86</b>																												
A	۰/۹۹۸۶۴	۱۸	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۶۷	۱۹	۶	۰/۹۵۴	۰/۸۶۸۶۵	۱۵	۰/۹۵۰	۰/۹۹۵۱۴	۳	۷۸۱	۰/۷۰۱	۰/۹۹۹۶۳	۱۹	۰/۹۵۳	۰/۹۹۹۶۳	۱۹	۰/۹۵۳	۰/۹۹۹۶۳	۱۹	۰/۹۵۳	۰/۹۹۹۶۳	۱۹	۰/۹۵۳		
B	۰/۹۹۸۶۴	۱۸	۰/۹۶۶	۰/۹۹۹۳۴	۱۳	۲۸	۰/۹۴۴	۰/۹۲۶۸۳	۱۱	۰/۹۵۱	۰/۹۹۶۳۳	۳	۶۲۱	۰/۷۵۲	۰/۹۹۹۵۳	۲۱	۰/۹۵۵	۰/۹۹۹۵۳	۲۱	۰/۹۵۵	۰/۹۹۹۵۳	۲۱	۰/۹۵۵	۰/۹۹۹۵۳	۲۱	۰/۹۵۵		
C	۰/۹۹۷۸۵	۲۳	۰/۹۷۵	۰/۹۹۸۸۰	۱۸	۳۳	۰/۹۴۹	۰/۹۰۱۵۰	۱۳	۰/۹۵۱	۰/۹۹۵۱۴	۳	۶۹۸	۰/۷۲۸	۰/۹۹۹۱۲	۲۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۹۱۲	۲۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۹۱۲	۲۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۹۱۲	۲۹	۰/۹۵۸		
D	۰/۹۹۸۸۶	۱۷	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۰۲	۱۶	۱۴	۰/۹۷۲	۰/۹۴۰۰۲	۱۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۴۵۴	۳	۵۶۴	۰/۷۷۶	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۶۴	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۶۴	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۶۴	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۶۴		
E	۰/۹۹۹۲۳	۱۴	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۴۲	۱۲	۱۵	۰/۹۷۱	۰/۹۴۳۲۱	۱۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۵۱۱	۳	۵۵۳	۰/۷۷۹	۰/۹۹۹۳۴	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۴	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۴	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۴	۲۵	۰/۹۶۵		
F	۰/۹۹۹۲۷	۱۳	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۴۰	۱۳	۱۳	۰/۹۷۳	۰/۹۴۱۲۷	۱۰	۰/۹۵۸	۰/۹۹۵۴۰	۳	۵۶۲	۰/۷۷۶	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۶۵		
G	۰/۹۹۹۲۸	۱۳	۰/۹۷۹	۰/۹۹۹۴۸	۱۲	۱۵	۰/۹۶۷	۰/۹۰۵۸۷	۱۳	۰/۹۵۲	۰/۹۹۴۷۰	۳	۶۸۴	۰/۷۳۳	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۰		
H	۰/۹۹۸۷۵	۱۸	۰/۹۸۲	۰/۹۹۸۹۲	۱۷	۱۴	۰/۹۷۰	۰/۸۷۴۸۳	۱۵	۰/۹۴۹	۰/۹۸۹۸۹	۵	۷۵۶	۰/۷۰۸	۰/۹۹۸۹۲	۳۲	۰/۹۵۸	۰/۹۹۸۹۲	۳۲	۰/۹۵۸	۰/۹۹۸۹۲	۳۲	۰/۹۵۸	۰/۹۹۸۹۲	۳۲	۰/۹۵۸		
I	۰/۹۹۹۰۱	۱۶	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۱۷	۱۵	۱۴	۰/۹۷۲	۰/۸۸۳۴۶	۱۴	۰/۹۵۰	۰/۹۸۹۹۹	۵	۷۳۴	۰/۷۱۶	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۵۹		
J	۰/۹۹۷۳۳	۲۶	۰/۹۹۲	۰/۹۹۷۶۴	۲۵	۱۹	۰/۹۷۶	۰/۸۷۰۴۴	۱۵	۰/۹۵۳	۰/۹۸۹۸۹	۵	۷۶۷	۰/۷۰۸	۰/۹۹۸۳۶	۴۰	۰/۹۶۴	۰/۹۹۸۳۶	۴۰	۰/۹۶۴	۰/۹۹۸۳۶	۴۰	۰/۹۶۴	۰/۹۹۸۳۶	۴۰	۰/۹۶۴		
K	۰/۹۹۸۹۵	۱۶	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۲۶	۱۴	۱۹	۰/۹۶۸	۰/۹۵۱۸۲	۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۶۶۷	۳	۵۱۹	۰/۷۹۰	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۵	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۵		
<b>SWWN5</b>																												
A	۰/۹۹۸۹۳	۱۶	۰/۹۹۷	۰/۹۹۸۹۳	۱۷	۰	۰/۹۹۷	۰/۷۷۷۱۸	۲۰	۰/۹۷۶	۰/۹۹۴۳۰	۴	۹۴۷	۰/۶۶۵	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۸۲		
B	۰/۹۹۶۶۴	۲۹	۱/۰۰۷	۰/۹۹۷۲۷	۲۷	۲۷	۰/۹۸۴	۰/۸۵۷۷۹	۱۶	۰/۹۷۷	۰/۹۹۵۷۸	۳	۸۰۷	۰/۷۱۲	۰/۹۹۸۶۷	۳۶	۰/۹۸۵	۰/۹۹۸۶۷	۳۶	۰/۹۸۵	۰/۹۹۸۶۷	۳۶	۰/۹۸۵	۰/۹۹۸۶۷	۳۶	۰/۹۸۵		
C	۰/۹۹۵۹۱	۳۲	۱/۰۱۶	۰/۹۹۶۶۰	۳۱	۲۴	۰/۹۹۶	۰/۸۲۵۶۷	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۹۲۱۱	۴	۸۶۷	۰/۶۹۲	۰/۹۹۸۰۶	۴۳	۰/۹۸۷	۰/۹۹۸۰۶	۴۳	۰/۹۸۷	۰/۹۹۸۰۶	۴۳	۰/۹۸۷	۰/۹۹۸۰۶	۴۳	۰/۹۸۷		
D	۰/۹۹۶۲۷	۳۰	۱/۰۲۶	۰/۹۹۶۳۶	۳۱	۱۱	۱/۰۱۷	۰/۸۸۶۷۷	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۳۴۰	۴	۷۳۴	۰/۷۴۱	۰/۹۹۸۰۴	۴۳	۰/۹۹۵	۰/۹۹۸۰۴	۴۳	۰/۹۹۵	۰/۹۹۸۰۴	۴۳	۰/۹۹۵	۰/۹۹۸۰۴	۴۳	۰/۹۹۵		
E	۰/۹۹۷۰۷	۲۷	۱/۰۲۷	۰/۹۹۷۰۹	۲۸	۵	۱/۰۲۳	۰/۸۹۱۸۳	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۲۶۴	۴	۷۱۹	۰/۷۴۶	۰/۹۹۸۱۵	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۵	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۵	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۵	۴۲	۰/۹۹۶		
F	۰/۹۹۷۱۶	۲۷	۱/۰۲۷	۰/۹۹۷۱۹	۲۷	۶	۱/۰۲۲	۰/۸۹۱۸۳	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۲۶۴	۴	۷۱۹	۰/۷۴۶	۰/۹۹۸۱۷	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۷	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۷	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۸۱۷	۴۲	۰/۹۹۶		
G	۰/۹۹۷۴۰	۲۵	۱/۰۲۳	۰/۹۹۷۴۷	۲۶	۱۰	۱/۰۱۵	۰/۸۳۷۴۱	۱۷	۰/۹۷۹	۰/۹۹۲۷۶	۴	۸۴۳	۰/۷۰۲	۰/۹۹۸۱۳	۴۲	۰/۹۹۱	۰/۹۹۸۱۳	۴۲	۰/۹۹۱	۰/۹۹۸۱۳	۴۲	۰/۹۹۱	۰/۹۹۸۱۳	۴۲	۰/۹۹۱		
H	۰/۹۹۶۰۷	۳۱	۱/۰۲۵	۰/۹۹۶۱۲	۳۲	۸	۱/۰۱۸	۰/۷۹۸۶۵	۱۹	۰/۹۷۴	۰/۹۸۳۵۴	۶	۸۹۹	۰/۶۸۰	۰/۹۹۷۴۵	۴۹	۰/۹۸۸	۰/۹۹۷۴۵	۴۹	۰/۹۸۸	۰/۹۹۷۴۵	۴۹	۰/۹۸۸	۰/۹۹۷۴۵	۴۹	۰/۹۸۸		
I	۰/۹۹۶۶۷	۳۰	۱/۰۲۷	۰/۹۹۶۶۰	۳۰	۶	۱/۰۲۲	۰/۸۰۶۵۲	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۸۴۷۴	۶	۸۸۷	۰/۶۸۶	۰/۹۹۷۵۴	۴۸	۰/۹۹۱	۰/۹۹۷۵۴	۴۸	۰/۹۹۱	۰/۹۹۷۵۴	۴۸	۰/۹۹۱	۰/۹۹۷۵۴	۴۸	۰/۹۹۱		
J	۰/۹۹۲۵۱	۴۳	۱/۰۳۷	۰/۹۹۲۹۰	۴۳	۲۱	۱/۰۱۹	۰/۷۸۸۰۶	۱۹	۰/۹۸۰	۰/۹۸۸۱۵	۵	۹۲۲	۰/۶۷۶	۰/۹۹۶۲۸	۶۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۶۲۸	۶۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۶۲۸	۶۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۶۲۸	۶۰	۰/۹۹۵		
K	۰/۹۹۵۳۳	۳۴	۱/۰۲۸	۰/۹۹۵۷۹	۳۳	۲۳	۱/۰۰۸	۰/۸۹۵۷۴	۱۴	۰/۹۸۵	۰/۹۹۵۰۰	۳	۷۱۴	۰/۷۴۸	۰/۹۹۷۷۸	۴۶	۰/۹۹۶	۰/۹۹۷۷۸	۴۶	۰/۹۹۶	۰/۹۹۷۷۸	۴۶	۰/۹۹۶	۰/۹۹۷۷۸	۴۶	۰/۹۹۶		
<b>B3PW91</b>																												
A	۰/۹۹۸۵۴	۱۹	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۵۷	۱۹	۶	۰/۹۵۴	۰/۸۶۷۴۱	۱۵	۰/۹۵۲	۰/۹۹۵۱۴	۳	۷۸۴	۰/۷۰۱	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۵۴	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۵۴	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۵۴	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۵۴		
B	۰/۹۹۸۴۹	۱۹	۰/۹۶۷	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۳۱	۰/۹۴۳	۰/۹۲۴۸۱	۱۲	۰/۹۵۲	۰/۹۹۵۶۵	۳	۶۲۶	۰/۷۵۲	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۵۶	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۵۶	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۵۶	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۵۶		

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	۲۰۰۰ cm <sup>-1</sup> پایین						۲۰۰۰ cm <sup>-1</sup> بالای						کل فرکانسها					
	روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲		روش ۱		روش ۲			
	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	R <sup>2</sup>	SD	β	α	R <sup>2</sup>	SD	α	
C	.۹۹۸۵۳	۱۹	.۹۷۵	.۹۹۹۱۰	۱۵	۲۶	.۹۵۵	.۸۸۸۷۷	۱۳	.۹۵۳	.۹۹۴۲۷	۴	۷.۳	.۸۷۷	.۹۹۹۲۹	۲۶	.۹۵۹	
D	.۹۹۸۹۴	۱۶	.۹۸۳	.۹۹۹۱۲	۱۵	۱۵	.۹۷۲	.۹۹۹۲۸	۱۰	.۹۵۹	.۹۹۴۵۴	۳	۵.۶	.۸۷۶	.۹۹۹۳۲	۲۵	.۹۶۶	
E	.۹۹۹۳۳	۱۳	.۹۸۴	.۹۹۹۴۷	۱۲	۱۳	.۹۷۴	.۹۹۴۸۹	۱۰	.۹۵۹	.۹۹۳۸۴	۴	۵.۴	.۸۸۲	.۹۹۹۳۷	۲۵	.۹۶۶	
F	.۹۹۹۳۳	۱۳	.۹۸۴	.۹۹۹۴۸	۱۲	۱۳	.۹۷۴	.۹۹۴۳۰	۱۰	.۹۵۹	.۹۹۴۶۳	۳	۵.۳	.۸۸۶	.۹۹۹۳۸	۲۴	.۹۶۶	
G	.۹۹۹۳۳	۱۳	.۹۸۰	.۹۹۹۵۳	۱۱	۱۵	.۹۶۸	.۹۰۹۹۰	۱۳	.۹۵۴	.۹۹۴۰۹	۴	۶.۷	.۸۳۹	.۹۹۹۳۱	۲۶	.۹۶۱	
H	.۹۹۸۸۷	۱۷	.۹۸۲	.۹۹۹۰۴	۱۶	۱۴	.۹۷۱	.۸۸۸۹۸	۱۵	.۹۵۰	.۸۸۸۹۳	۵	۷.۴	.۸۸۲	.۹۹۸۹۶	۳۱	.۹۵۹	
I	.۹۹۹۱۲	۱۵	.۹۸۴	.۹۹۹۲۸	۱۴	۱۴	.۹۷۳	.۸۸۵۰۹	۱۴	.۹۵۱	.۹۸۹۴۳	۵	۷.۲	.۸۷۸	.۹۹۹۰۱	۳۱	.۹۶۰	
J	.۹۹۷۳۵	۲۶	.۹۹۲	.۹۹۷۷۴	۲۴	۲۱	.۹۷۵	.۸۶۹۹۱	۱۵	.۹۵۴	.۸۸۸۲۳	۵	۷.۶	.۸۰۹	.۹۹۸۳۹	۳۹	.۹۶۵	
K	.۹۹۸۸۱	۱۷	.۹۸۵	.۹۹۹۲۰	۱۵	۲۱	.۹۶۸	.۹۵۴۷۶	۹	.۹۵۹	.۹۹۶۱۷	۳	۵.۴	.۸۹۷	.۹۹۹۲۸	۲۶	.۹۶۶	
<b>MP2</b>																		
A	.۹۹۱۴۹	۴۶	.۹۴۸	.۹۹۱۴۹	۴۷	-۳	.۹۵۰	.۹۱۰۵۴	۱۳	.۹۵۱	.۹۷۹۴۴	۷	۶.۲	.۸۵۱	.۹۹۸۳۳	۴۰	.۹۵۰	
B	.۹۹۸۹۷	۱۶	.۹۴۸	.۹۹۹۱۳	۱۵	۱۴	.۹۳۸	.۸۶۳۲۱	۱۶	.۹۳۶	.۹۶۷۰۹	۹	۷.۳	.۸۰۵	.۹۹۹۶۲	۱۹	.۹۳۹	
C	.۹۹۸۹۸	۱۶	.۹۵۱	.۹۹۹۲۲	۱۴	۱۷	.۹۳۸	.۸۳۹۲۷	۱۷	.۹۲۸	.۹۷۲۶۶	۸	۸.۴	.۶۷۷	.۹۹۹۳۱	۲۶	.۹۳۵	
D	.۹۹۹۶۵	۹	.۹۷۲	.۹۹۹۷۲	۹	۹	.۹۶۵	.۸۷۰۰۰	۱۵	.۹۴۴	.۹۶۸۰۴	۸	۷.۸	.۸۷۱	.۹۹۹۳۲	۲۵	.۹۵۲	
E	.۹۹۹۶۶	۹	.۹۷۳	.۹۹۹۶۸	۹	۷	.۹۶۸	.۸۷۴۵۱	۱۵	.۹۴۵	.۹۷۰۹۹	۸	۷.۳	.۸۷۹	.۹۹۹۳۰	۲۶	.۹۵۳	
F	.۹۹۹۶۶	۹	.۹۷۴	.۹۹۹۷۰	۹	۹	.۹۶۷	.۸۷۲۷۵	۱۵	.۹۴۵	.۹۷۱۸۷	۸	۷.۲	.۸۷۱	.۹۹۹۲۸	۲۶	.۹۵۳	
G	.۹۹۸۹۲	۱۶	.۹۶۰	.۹۹۹۰۸	۱۶	۱۴	.۹۴۹	.۸۳۶۷۲	۱۷	.۹۳۱	.۹۷۳۲۰	۸	۸.۱	.۶۸۸	.۹۹۹۱۱	۲۹	.۹۳۹	
H	.۹۹۹۲۵	۱۴	.۹۶۰	.۹۹۹۲۸	۱۴	۶	.۹۵۶	.۸۰۷۴۴	۲۳	.۹۳۰	.۹۵۲۰۸	۱۰	۹.۵	.۶۱۷	.۹۹۹۰۳	۳۰	.۹۳۸	
I	.۹۹۹۰۶	۱۵	.۹۶۴	.۹۹۹۰۶	۱۶	۳	.۹۶۲	.۸۶۷۵۲	۲۱	.۹۳۲	.۹۶۰۵۸	۹	۹.۵	.۶۳۴	.۹۹۸۹۳	۳۲	.۹۴۱	
J	.۹۹۹۲۸	۱۳	.۹۸۱	.۹۹۹۲۵	۱۳	۹	.۹۷۴	.۸۹۷۰۳	۱۹	.۹۴۰	.۹۵۸۰۰	۱۰	۸.۶	.۶۶۷	.۹۹۸۵۶	۳۷	.۹۵۲	
<b>HF</b>																		
D	.۹۹۸۶۲	۱۸	.۹۸۴	.۹۹۹۱۷	۱۵	۲۵	.۹۶۴	.۸۰۱۳۴	۱۹	.۹۵۶	.۹۳۰۱۶	۱۲	۸.۰	.۶۹۷	.۹۹۹۰۷	۳۰	.۹۶۴	
B	.۹۹۹۱۱	۱۵	.۹۸۴	.۹۹۹۲۵	۱۴	۱۳	.۹۷۳	.۸۷۹۰۰	۱۵	.۹۵۷	.۹۰۵۲۵	۱۴	۶.۷	.۸۰۳	.۹۹۹۲۵	۲۷	.۹۶۴	
<b>MP3</b>																		
D	.۹۹۸۱۶	۱۷	.۹۸۲	.۹۹۹۲۸	۱۴	۲۴	.۹۶۲	.۶۶۹۲۸	۲۴	.۹۵۸	.۸۳۶۸۰	۱۹	۹.۲	.۶۶۱	.۹۹۹۲۲	۲۷	.۹۶۵	
B	.۹۹۸۳۳	۲۰	.۹۸۳	.۹۹۸۹۷	۱۶	۲۷	.۹۶۱	.۸۴۰۳۱	۲۱	.۹۵۷	.۸۳۶۶۳	۱۹	۷.۵	.۸۷۵	.۹۹۹۱۰	۲۹	.۹۶۵	

<sup>a</sup>A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, and K stand for 6-31G, 6-31G\*, 6-31G\*\*, 6-31IG\*\*, 6-31I+G\*\*, 6-31I+G\*\*, 6-31I+G\*\*, 6-31I+G\*\*, D95+\*\*, D95+\*\*, D95+\*\*, and cc-pVTZ basis sets, respectively.

جدول ۲- مقادیر شدتهای تجربی و نظری مادون قرمز استون<sup>a</sup>.

Levels/basis sets	Frequency range(cm <sup>-1</sup> )										R <sup>2</sup>	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp <sup>5</sup>	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
<b>B3LYP</b>													
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	
<b>B972</b>													
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	
<b>BLYP</b>													
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 ۲.

Levels/basis sets	Frequency range(cm <sup>-1</sup> )									R <sup>2</sup>	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰			
Exp/ <sup>5</sup>	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷			
<b>G96LYP</b>												
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
<b>BP86</b>												
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
<b>B3P86</b>												
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 <sup>-1</sup> )										R <sup>2</sup>	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp/ <sup>δ</sup>	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
<b>SVWN5</b>													
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	
<b>B3PW91</b>													
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	
<b>MP2</b>													
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 <sup>-1</sup> )										R <sup>2</sup>	SD	α
	۳۸۴	۴۸۳-۵۲۸	۷۷۹	۸۹۶	۱۰۶۷-۱۰۹۳	۱۲۱۸	۱۳۶۰-۱۴۵۶	۱۷۳۸	۲۹۲۶-۳۰۲۰				
Exp/ <sup>δ</sup>	۰/۷	۱۷	۱/۴۴	۷/۳	۴/۳	۶۴/۹	۱۰۴	۱۴۰	۴۴/۷				
<b>HF</b>													
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	
<b>MP3</b>													
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 R<sup>2</sup> 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<sup>a</sup>.

	C=O (Å)	C-C (Å)	C-H (Å)	<CCO	<CCC	μ (Debye)
Exp <sup>24</sup>	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
<b>B3LYP</b>						
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	$\mu$ (Debye)
Exp <sup>24</sup>	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
<b>B972</b>						
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
<b>BLYP</b>						
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
<b>G96LYP</b>						
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	$\mu$ (Debye)
Exp <sup>24</sup>	۱/۲۲۲	۱/۵۰۷	۱/۰۸۵	۱۲۱/۴	۱۱۷/۲	۲/۹
<b>BP86</b>						
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
<b>B3P86</b>						
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
<b>SVWN5</b>						
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
<b>B3PW91</b>						
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	$\mu$ (Debye)
Exp <sup>24</sup>	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
<b>MP2</b>						
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
<b>HF</b>						
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
<b>MP3</b>						
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. Cimraglia, *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.

