مجله شیمی کوانتومی و اسپکتروسکوپی
۱:۱ (۱۳۹۰) ۱-۱۶
Journal of Quantum Chemistry and Spectroscopy (JQCS)

کارآیی روش‌های نظریه تابع چگال در محاسبه خواص مولکولی استون

سید فرامرز طیاری[۱*]، منصوره زاهدی تبریزی[۲]، حسین عزیزی توپکانلو[۳]، فرناز نقوی [٤]

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

[۲]دانشگاه الزهرا، 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**، 6-311++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.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگال، فرکانس های ارتعاشی، شدت های نوارهای مادون قرمز، پارامترهای ساختاری، ممان دوقطبی.

۱. مقدمه

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 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 سود مند باشد. دانش ما درباره کارآیی این روشها در پیش بینی خواص مولکولی می تواند به ما در گزینش

[*]**عهده دار مکاتبات:** سید فرامرز طیاری

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

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

بهترین روش با صرفه‌جویی در وقت و هزینه برای مطالعه مولکولهای نا شناخته 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 [۷-۳]. ولی تعیین این داده‌ها از روی طیفهای تجربی IR کار مشکلی است و در نتیجه روشهای نظری برای محاسبه شدتها بسیار مفید ند. به علاوه، محاسبه شدت نوارهای IR توسط روشهای MP2 وHF 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 بسآمدهای 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 $۳۰۰-۴۰۰۰cm^{-1}$ انجام دادند. این پژوهشگران نتوانستند شیوه های ارتعاشی A_2 مربوط به پیچش گروههای CH_3 را مشاهده کنند. فیلیس و همکاران [۱۲] با استفاده از تکنیک یونش چند فوتونی تشدید دوفوتونی فرابنفش، بسامد υ_{12}(شیوه A_2 مربوط به پیچش گروه CH_3) را برابر $۷۷\pm۲\ cm^{-1}$ به دست آوردند. اسمییرز و همکاران [۱۳] هر دوتا شیوه ارتعاشی گروه CH_3، υ_{12} و υ_{17} را با دقت بیشتر به ترتیب در ۷۷ و $۱۲۵\ cm^{-1}$ 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.

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 B[۱۶]، B3[۱۷] و G96[۱۸] که با توابع همبستگی غیر موضعی PW91[۱۹]، LYP[۲۰]، P86[۲۱] و 972 پیوند یافته اند. در نتیجه توابع B3LYP، BLYP، G96LYP، BP86، B3P86، B3PW91 و B972[۲۲-۲۳] 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:

$$\nu_{obs} = \alpha \nu_{Theo} \qquad (۱)$$

$$\nu_{obs} = \alpha \nu_{Theo} + \beta \qquad (۲)$$

که در آن ν_{Theo} و ν_{obs} به ترتیب بسامدهای هماهنگ محاسبه شده و تجربی در بعد cm^{-1} اند (داده‌های تجربی از مرجع ۲۴ استخراج شده‌اند به جز اعداد موج ۸۷۲، ۱۲۵و cm^{-1} ۷۷ که به ترتیب بر گرفته از مراجع ۱۴ و ۱۳ هستند). داده‌های تجربی استفاده شده در این پژوهش در حالت گازی هستند. ضریب مقیاس‌گذاری (α)، ضریب رگرسیون (R^2) و انحراف معیار (SD) در (جدول-۱) فهرست شده‌اند. 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 می‌شود 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 میزان‌پذیری به صورت جدا برای دو ناحیه زیر ۲۰۰۰ و بالای $۲۰۰۰cm^{-1}$ 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 مقیاس‌گذاری ۰/۹۷۰- ۰/۹۵۸برای سطح B3LYP با به کارگیری توابع پایه مختلف با استفاده از روش ۱ برای کل نواحی بسامدها به‌دست آمد. همان طور که در جدول یک نشان داده شده 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 ازمرجع-۵ استخراج شده‌اند). تجزیه و تحلیل رگرسیون شدتهای نوارهای زیر قرمز با استفاده از معادله زیر انجام شد:

$$I_{obs} = \alpha I_{theo} \qquad (۳)$$

که در آن I_{obs} و I_{theo} به ترتیب شدت نوارهای زیر قرمز مشاهده شده و نظری اند. R^2، ضریب میزان‌پذیری (α) و انحراف معیار (SD) در جدول ۲ فهرست شده‌اند. (جدول-۲) نشان می‌دهد 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. همان‌طور که در این جدول نشان داده شده اندازه شدتهای مادون قرمز محاسباتی به توابع پایه و سطوح محاسباتی بسیار وابسته است. روند تغییرR^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 می‌دهد که تفاوت مشخص و روشنی بین نتایج به دست آمده از BLYP و B3LYP است. تغییراتR^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 می‌دهد که شدتهای مادون قرمزمحاسباتی 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 می‌توان 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

جدول ۱- ضریب رگرسیون، فاکتور میزان پذیری و انحراف استاندارد محاسباتی استون[a].

Levels/	پایین $2000cm^{-1}$						بالای $2000cm^{-1}$						کل فرکانسها		
	روش ۱		روش ۲				روش ۱		روش ۲				روش ۱		
basis set	R^2	SD	α	R^2	SD	β	α	R^2	SD	α	R^2	SD	α	R^2	SD	α
B3LYP																
A	۰/۹۷۹۸	۲۲	۰/۹۶۰	۰/۹۹۷۹۹	۲۳	۵	۰/۹۵۶	۰/۹۱۴۲۹	۱۲	۰/۹۵۷	۰/۹۹۶۴۰	۳	۶۶۳	۰/۷۴۳	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	۰/۷۸۶	۰/۹۹۹۷۵	۱۵	۰/۹۶۰
C	۰/۹۹۹۰۲	۱۶	۰/۹۷۴	۰/۹۹۹۴۲	۱۲	۲۲	۰/۹۵۷	۰/۹۳۵۸۸	۱۱	۰/۹۵۸	۰/۹۹۶۶۹	۳	۵۸۹	۰/۷۶۸	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	۰/۸۲۸	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	۰/۸۳۵	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	۰/۸۳۵	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	۰/۷۸۴	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	۰/۷۵۱	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	۰/۷۶۰	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	۰/۷۶۴	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	۰/۸۵۰	۰/۹۹۹۶۴	۱۸	۰/۹۶۹
B972																	
A	۰/۹۹۸۲۲	۲۱	۰/۹۳۵	۰/۹۹۸۳۱	۲۱	۱۱	۰/۹۴۵	۰/۸۴۳۶۱	۱۷	۰/۹۴۶	۰/۹۹۳۱۳	۴	۸۳۱	۰/۶۸۱	۰/۹۹۹۵۵	۲۱	۰/۹۸۴
B	۰/۹۹۸۶۸	۱۸	۰/۹۶۱	۰/۹۹۹۳۹	۱۳	۲۹	۰/۹۳۹	۰/۹۰۶۸۵	۱۳	۰/۹۴۷	۰/۹۹۵۹۸	۳	۶۸۵	۰/۷۲۹	۰/۹۹۹۵۴	۲۱	۰/۹۵۱
C	۰/۹۹۸۵۳	۱۹	۰/۹۷۰	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۲۶	۰/۹۴۹	۰/۸۸۴۸۴	۱۴	۰/۹۴۷	۰/۹۹۲۵۸	۴	۷۳۷	۰/۷۱۲	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۳
D	۰/۹۹۸۷۲	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۲۲	۰/۹۵۹	۰/۹۲۹۵۲	۱۱	۰/۹۵۳	۰/۹۹۳۸۰	۴	۶۰۳	۰/۷۵۹	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۵۹
E	۰/۹۹۹۳۹	۱۲	۰/۹۷۸	۰/۹۹۹۶۱	۱۰	۱۶	۰/۹۶۵	۰/۹۲۷۴۱	۱۱	۰/۹۵۳	۰/۹۹۴۲۳	۴	۶۱۲	۰/۷۵۷	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	۰/۷۶۰	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	۰/۷۱۵	۰/۹۹۹۲۷	۲۶	۰/۹۵۵
H	۰/۹۹۹۰۳	۱۵	۰/۹۷۶	۰/۹۹۹۲۴	۱۴	۱۶	۰/۹۶۳	۰/۸۵۱۸۵	۱۶	۰/۹۴۴	۰/۹۸۴۲۸	۶	۷۹۸	۰/۶۹۰	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	۰/۶۹۴	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	۰/۶۹۰	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	۰/۷۷۹	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۱
BLYP																	
A	۰/۹۹۶۵۰	۲۹	۰/۹۹۰	۰/۹۹۶۵۴	۳۰	۷	۰/۹۸۷	۰/۸۹۰۴۸	۱۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۴۸۱	۳	۷۲۷	۰/۷۴۲	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۸۵
B	۰/۹۹۸۹۲	۱۶	۱/۰۰۶	۰/۹۹۹۳۵	۱۳	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۲۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۴۲۸	۴	۶۱۸	۰/۷۷۹	۰/۹۹۹۳۹	۲۴	۰/۹۹۰
C	۰/۹۹۸۹۵	۱۶	۱/۰۰۶	۰/۹۹۹۳۵	۱۳	۲۲	۰/۹۸۸	۰/۹۲۵۸۶	۱۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۴۲۸	۴	۶۱۸	۰/۷۷۹	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	۰/۸۴۸	۰/۹۹۹۳۰	۲۶	۰/۹۹۶

ادامه جدول ۱.

Levels/ basis set	پایین $2000cm^{-1}$						بالای $2000cm^{-1}$						کل فرکانسها					
	روش ۱			روش ۲			روش ۱			روش ۲			روش ۱					
	R^2	SD	α	R^2	SD	β	R^2	SD	α	R^2	SD	β	α	R^2	SD	α	R^2	SD	α
E	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۱/۰۱۵	۰/۹۹۹۴۳	۱۲	۱۸	۱/۰۰۰	۰/۹۶۶۳۷	۸	۰/۹۸۹	۰/۹۹۲۲۴	۴	۴۱۳	۰/۸۵۲	۰/۹۹۹۳۶	۲۵	۰/۹۹۷	
F	۰/۹۹۹۲۷	۱۳	۱/۰۱۵	۰/۹۹۹۴۸	۱۲	۱۶	۱/۰۰۲	۰/۹۶۴۷۰	۸	۰/۹۸۹	۰/۹۹۱۰۳	۴	۴۱۷	۰/۸۵۱	۰/۹۹۹۳۹	۲۴	۰/۹۹۷	
G	۰/۹۹۹۱۵	۱۴	۱/۰۱۳	۰/۹۹۹۴۹	۱۲	۲۰	۰/۹۹۷	۰/۹۳۷۴۵	۱۱	۰/۹۸۵	۰/۹۹۴۱۶	۴	۵۷۳	۰/۷۹۵	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۹۳	
H	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۱/۰۱۷	۰/۹۹۹۴۳	۱۲	۱۱	۱/۰۰۸	۰/۹۱۹۶۶	۱۲	۰/۹۸۱	۰/۹۹۶۶۰	۳	۶۴۶	۰/۷۶۸	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۹۱	
I	۰/۹۹۹۵۲	۱۱	۱/۰۱۹	۰/۹۹۹۶۱	۱۰	۱۱	۱/۰۱۰	۰/۹۲۱۴۲	۱۲	۰/۹۸۴	۰/۹۹۵۴۹	۳	۶۳۷	۰/۷۷۳	۰/۹۹۹۰۴	۳۰	۰/۹۹۴	
J	۰/۹۹۹۰۱	۱۶	۱/۰۲۷	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۱۲	۱/۰۱۷	۰/۹۲۱۳۹	۱۲	۰/۹۸۸	۰/۹۹۵۴۰	۳	۶۳۷	۰/۷۷۶	۰/۹۹۸۷۴	۳۵	۰/۹۹۹	
K	۰/۹۹۹۱۱	۱۵	۱/۰۱۳	۰/۹۹۹۴۱	۱۲	۱۹	۰/۹۹۷	۰/۹۶۸۹۰	۷	۰/۹۸۹	۰/۹۸۹۱۲	۵	۳۷۲	۰/۸۶۵	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۵	
G96LYP																		
A	۰/۹۹۶۵۰	۲۹	۰/۹۹۰	۰/۹۹۶۵۹	۳۰	۱۰	۰/۹۸۲	۰/۸۸۹۰۸	۱۴	۰/۹۸۱	۰/۹۹۵۲۰	۳	۷۳۲	۰/۷۴۰	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۸۴	
B	۰/۹۹۸۳۴	۲۰	۰/۹۹۷	۰/۹۹۹۱۶	۱۵	۳۱	۰/۹۷۲	۰/۹۳۶۰۹	۱۱	۰/۹۸۲	۰/۹۹۲۲۰	۴	۵۷۱	۰/۷۹۴	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۸۷	
C	۰/۹۹۸۲۳	۲۱	۱/۰۰۵	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	۰/۹۷۹	۰/۹۲۹۲۰	۱۱	۰/۹۸۲	۰/۹۹۵۷۵	۳	۶۱۱	۰/۷۸۰	۰/۹۹۹۲۵	۲۷	۰/۹۸۸	
D	۰/۹۹۹۲۴	۱۴	۱/۰۱۲	۰/۹۹۹۱۴	۱۵	۳۲	۰/۹۷۹	۰/۹۶۲۹۵	۸	۰/۹۸۷	۰/۹۹۴۳۱	۴	۴۴۸	۰/۱۳۸	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۴	
E	۰/۹۹۹۴۶	۱۳	۱/۰۱۳	۰/۹۹۹۴۳	۱۲	۱۵	۱/۰۰۰	۰/۹۶۳۹۱	۸	۰/۹۸۷	۰/۹۹۳۶۸	۴	۴۳۹	۰/۱۸۱	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۴	
F	۰/۹۹۹۳۷	۱۲	۱/۰۱۳	۰/۹۹۹۵۲	۱۱	۱۴	۱/۰۰۲	۰/۹۶۴۰۹	۸	۰/۹۸۷	۰/۹۹۳۸۳	۴	۴۳۸	۰/۱۴۲	۰/۹۹۹۴۱	۲۴	۰/۹۹۴	
G	۰/۹۹۹۳۸	۱۲	۱/۰۱۰	۰/۹۹۹۵۱	۱۱	۱۳	۱/۰۰۲	۰/۹۳۷۷۹	۱۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۵۱۹	۳	۵۹۵	۰/۷۸۶	۰/۹۹۹۳۳	۲۵	۰/۹۹۱	
H	۰/۹۹۹۳۴	۱۳	۱/۰۱۴	۰/۹۹۹۵۵	۱۱	۱۴	۰/۹۹۸	۰/۹۱۶۳۳	۱۲	۰/۹۸۰	۰/۹۹۵۶۷	۳	۶۵۵	۰/۷۶۴	۰/۹۹۹۰۲	۳۱	۰/۹۸۹	
I	۰/۹۹۹۴۴	۱۲	۱/۰۱۶	۰/۹۹۹۵۲	۱۱	۱۵	۱/۰۰۲	۰/۹۲۰۳۹	۱۲	۰/۹۸۲	۰/۹۹۵۵۱	۳	۶۴۱	۰/۷۷۰	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۱	
J	۰/۹۹۸۳۷	۲۰	۱/۰۲۵	۰/۹۹۹۶۳	۱۰	۱۵	۱/۰۰۳	۰/۹۱۹۱۷	۱۲	۰/۹۸۶	۰/۹۹۶۶۴	۳	۶۴۸	۰/۷۷۱	۰/۹۹۸۶۳	۳۶	۰/۹۹۷	
K	۰/۹۹۹۱۹	۱۴	۱/۰۱۱	۰/۹۹۸۸۱	۱۸	۲۳	۱/۰۰۶	۰/۹۹۹۶۰	۷	۰/۹۸۷	۰/۹۹۱۴۹	۴	۳۸۵	۰/۸۵۹	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۹۴	
BP86																		
A	۰/۹۹۷۷۴	۲۴	۰/۹۹۴	۰/۹۹۷۷۹	۲۴	۸	۰/۹۸۸	۰/۸۴۵۵۴	۱۷	۰/۹۷۹	۰/۹۹۷۰۴	۳	۸۳۴	۰/۷۰۵	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۸۴	
B	۰/۹۹۸۸۵	۱۷	۱/۰۰۲	۰/۹۹۹۴۰	۱۳	۲۵	۰/۹۸۱	۰/۹۱۸۶۵	۱۲	۰/۹۸۱	۰/۹۹۷۵۷	۲	۶۵۳	۰/۷۶۵	۰/۹۹۹۴۴	۲۳	۰/۹۸۷	
C	۰/۹۹۸۸۶	۱۷	۱/۰۱۱	۰/۹۹۹۳۱	۱۳	۲۳	۰/۹۹۲	۰/۸۹۷۰۰	۱۴	۰/۹۸۰	۰/۹۹۶۷۸	۳	۷۱۷	۰/۷۴۴	۰/۹۹۹۰۹	۳۰	۰/۹۸۹	
D	۰/۹۹۹۲۶	۱۴	۱/۰۱۹	۰/۹۹۹۳۷	۱۳	۱۲	۱/۰۱۰	۰/۹۳۸۳۲	۱۰	۰/۹۸۶	۰/۹۹۶۶۰	۳	۵۷۹	۰/۷۹۴	۰/۹۹۹۰۷	۳۰	۰/۹۹۵	
E	۰/۹۹۹۵۵	۱۱	۱/۰۲۰	۰/۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰۱۲	۰/۹۴۲۸۸	۱۰	۰/۹۸۶	۰/۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	۰/۸۰۱	۰/۹۹۹۰۸	۳۰	۰/۹۹۵	
F	۰/۹۹۹۵۶	۱۰	۱/۰۲۰	۰/۹۹۹۶۴	۱۰	۱۰	۱/۰۱۲	۰/۹۴۲۸۸	۱۰	۰/۹۸۶	۰/۹۹۶۳۷	۳	۵۵۹	۰/۸۰۱	۰/۹۹۹۰۸	۳۰	۰/۹۹۵	
G	۰/۹۹۹۵۸	۱۰	۱/۰۱۷	۰/۹۹۹۷۰	۹	۱۲	۱/۰۰۷	۰/۸۹۷۲۹	۱۳	۰/۹۸۲	۰/۹۹۶۳۸	۳	۷۱۳	۰/۷۴۶	۰/۹۹۹۰۳	۳۰	۰/۹۹۱	
H	۰/۹۹۹۱۶	۱۴	۱/۰۱۹	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۱۲	۱/۰۰۹	۰/۸۷۶۴۷	۱۵	۰/۹۷۷	۰/۹۹۴۱۴	۴	۷۶۱	۰/۷۲۷	۰/۹۹۸۵۸	۳۷	۰/۹۸۹	
I	۰/۹۹۹۴۶	۱۲	۱/۰۲۱	۰/۹۹۹۵۶	۱۱	۱۱	۱/۰۱۲	۰/۸۸۲۱۴	۱۴	۰/۹۸۰	۰/۹۹۴۵۸	۳	۷۴۸	۰/۷۳۳	۰/۹۹۸۶۶	۳۶	۰/۹۹۱	

ادامه جدول ۱.

	کل فرکانسها			بالای $2000cm^{-1}$				پایین $2000cm^{-1}$							
Levels/	روش ۱			روش ۲				روش ۱			روش ۲				
basis set	R^2	SD	α	R^2	SD	α	β	R^2	SD	α	R^2	SD	α	β	α
J	۰/۹۹۸۱۶	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۴۶۳	۳	۰/۷۲۵	۷۸۲	۰/۸۶۷۹۰	۱۵	۰/۹۸۳	۰/۹۹۸۵۸	۱۹	۱۳	۱/۰۲۰	۱/۰۳۰	۰/۹۹۸۴۴	۲۰
K	۰/۹۹۹۰۵	۳۰	۰/۹۹۵	۰/۹۹۶۲۴	۳	۰/۸۰۷	۵۳۹	۰/۹۴۷۴۲	۱۰	۰/۹۸۶	۰/۹۹۹۵۱	۱۱	۱۹	۱/۰۰۴	۱/۰۲۰	۰/۹۹۹۲۱	۱۴
B3P86																	
A	۰/۹۹۹۶۳	۱۹	۰/۹۵۳	۰/۹۹۵۱۴	۳	۰/۷۰۱	۷۸۱	۰/۸۶۸۶۵	۱۵	۰/۹۵۰	۰/۹۹۸۶۷	۱۹	۶	۰/۹۵۴	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۶۴	۱۸
B	۰/۹۹۹۵۳	۲۱	۰/۹۵۵	۰/۹۹۶۳۳	۳	۰/۷۵۲	۶۲۱	۰/۹۲۶۸۳	۱۱	۰/۹۵۱	۰/۹۹۹۳۴	۱۳	۲۸	۰/۹۴۴	۰/۹۶۶	۰/۹۹۸۶۴	۱۸
C	۰/۹۹۹۱۲	۲۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۵۱۴	۳	۰/۷۲۸	۶۹۸	۰/۹۰۱۵۰	۱۳	۰/۹۵۱	۰/۹۹۸۸۰	۱۸	۳۳	۰/۹۴۹	۰/۹۷۵	۰/۹۹۷۸۵	۲۳
D	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۶۴	۰/۹۹۴۵۴	۳	۰/۷۷۶	۵۶۴	۰/۹۴۰۰۲	۱۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۹۰۲	۱۶	۱۴	۰/۹۷۲	۰/۹۸۳	۰/۹۹۸۸۶	۱۷
E	۰/۹۹۹۳۴	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۵۱۱	۳	۰/۷۷۹	۵۵۳	۰/۹۴۳۲۱	۱۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۹۴۲	۱۲	۱۵	۰/۹۷۱	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۲۳	۱۴
F	۰/۹۹۹۳۵	۲۵	۰/۹۶۵	۰/۹۹۵۴۰	۳	۰/۷۷۶	۵۶۲	۰/۹۴۱۲۷	۱۰	۰/۹۵۸	۰/۹۹۹۴۰	۱۳	۱۳	۰/۹۷۳	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۲۷	۱۳
G	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۰	۰/۹۹۴۷۰	۳	۰/۷۳۳	۶۸۴	۰/۹۰۵۸۷	۱۳	۰/۹۵۲	۰/۹۹۹۴۸	۱۲	۱۵	۰/۹۶۷	۰/۹۷۹	۰/۹۹۹۲۸	۱۳
H	۰/۹۹۸۹۲	۳۲	۰/۹۵۸	۰/۹۸۹۸۹	۵	۰/۷۰۸	۷۵۶	۰/۸۷۴۸۳	۱۵	۰/۹۴۹	۰/۹۹۸۹۲	۱۷	۱۴	۰/۹۷۰	۰/۹۸۲	۰/۹۹۸۷۵	۱۸
I	۰/۹۹۸۹۸	۳۱	۰/۹۵۹	۰/۹۸۹۹۹	۵	۰/۷۱۶	۷۳۴	۰/۸۸۳۶۴	۱۴	۰/۹۵۰	۰/۹۹۹۱۷	۱۵	۱۴	۰/۹۷۲	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۰۱	۱۶
J	۰/۹۹۸۳۶	۴۰	۰/۹۶۴	۰/۹۸۹۸۹	۵	۰/۷۰۸	۷۶۷	۰/۸۷۰۴۴	۱۵	۰/۹۵۳	۰/۹۹۷۶۴	۲۵	۱۹	۰/۹۷۶	۰/۹۹۲	۰/۹۹۷۳۳	۲۶
K	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۵	۰/۹۹۶۴۷	۳	۰/۷۹۰	۵۱۹	۰/۹۵۱۸۲	۹	۰/۹۵۸	۰/۹۹۹۲۶	۱۴	۱۹	۰/۹۶۸	۰/۹۸۳	۰/۹۹۸۹۵	۱۶
SVWN5																	
A	۰/۹۹۹۴۰	۲۴	۰/۹۸۲	۰/۹۹۴۳۰	۴	۰/۶۶۵	۹۴۷	۰/۷۷۷۱۸	۲۰	۰/۹۷۶	۰/۹۹۸۹۳	۱۷	۰	۰/۹۹۷	۰/۹۹۷	۰/۹۹۸۹۳	۱۶
B	۰/۹۹۸۶۷	۳۶	۰/۹۸۵	۰/۹۹۵۷۸	۳	۰/۷۱۲	۸۰۷	۰/۸۵۷۷۹	۱۶	۰/۹۷۷	۰/۹۹۷۲۷	۲۷	۲۷	۰/۹۸۴	۱/۰۰۷	۰/۹۹۶۶۴	۲۹
C	۰/۹۹۸۰۶	۴۳	۰/۹۸۷	۰/۹۹۲۱۱	۴	۰/۶۹۲	۸۶۷	۰/۸۲۵۴۷	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۹۶۴۰	۳۱	۲۴	۰/۹۹۶	۱/۰۱۶	۰/۹۹۵۹۱	۳۲
D	۰/۹۹۸۰۴	۴۳	۰/۹۹۵	۰/۹۹۳۴۰	۴	۰/۷۴۱	۷۳۴	۰/۸۸۶۷۷	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۶۳۶	۳۱	۱۱	۱/۰۱۷	۱/۰۲۶	۰/۹۹۶۲۷	۳۰
E	۰/۹۹۸۱۵	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۲۶۴	۴	۰/۷۴۶	۷۱۹	۰/۸۹۱۸۳	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۷۰۹	۲۸	۵	۱/۰۲۳	۱/۰۲۷	۰/۹۹۷۰۷	۲۷
F	۰/۹۹۸۱۷	۴۲	۰/۹۹۶	۰/۹۹۲۶۴	۴	۰/۷۴۶	۷۱۹	۰/۸۹۱۸۳	۱۴	۰/۹۸۴	۰/۹۹۷۱۹	۲۷	۶	۱/۰۲۲	۱/۰۲۷	۰/۹۹۷۱۶	۲۷
G	۰/۹۹۸۱۳	۴۲	۰/۹۹۱	۰/۹۹۲۷۶	۴	۰/۷۰۲	۸۴۳	۰/۸۳۷۴۱	۱۷	۰/۹۷۹	۰/۹۹۷۴۷	۲۶	۱۰	۱/۰۱۵	۱/۰۲۳	۰/۹۹۷۴۰	۲۵
H	۰/۹۹۷۴۵	۴۹	۰/۹۸۸	۰/۹۸۳۵۴	۶	۰/۶۸۰	۸۹۹	۰/۷۹۸۶۵	۱۹	۰/۹۷۴	۰/۹۹۶۱۲	۳۲	۸	۱/۰۱۸	۱/۰۲۵	۰/۹۹۶۰۷	۳۱
I	۰/۹۹۷۵۴	۴۸	۰/۹۹۱	۰/۹۸۴۷۴	۶	۰/۶۸۶	۸۸۷	۰/۸۰۶۵۲	۱۸	۰/۹۷۷	۰/۹۹۶۵۰	۳۰	۶	۱/۰۲۲	۱/۰۲۷	۰/۹۹۶۴۷	۳۰
J	۰/۹۹۶۲۸	۶۰	۰/۹۹۵	۰/۹۸۸۷۵	۵	۰/۶۷۶	۹۲۲	۰/۷۸۸۶	۱۹	۰/۹۸۰	۰/۹۹۲۹۰	۴۳	۲۱	۱/۰۱۹	۱/۰۳۷	۰/۹۹۲۵۱	۴۳
K	۰/۹۹۷۸۱	۴۶	۰/۹۹۶	۰/۹۹۵۰۰	۳	۰/۷۴۸	۷۱۴	۰/۸۹۵۷۴	۱۴	۰/۹۸۵	۰/۹۹۵۷۹	۳۳	۲۳	۱/۰۰۸	۱/۰۲۸	۰/۹۹۵۳۳	۳۴
B3PW91																	
A	۰/۹۹۹۶۲	۱۹	۰/۹۵۴	۰/۹۹۵۱۴	۳	۰/۷۰۱	۷۸۴	۰/۸۶۷۴۱	۱۵	۰/۹۵۲	۰/۹۹۸۵۷	۱۹	۶	۰/۹۵۴	۰/۹۵۹	۰/۹۹۸۵۴	۱۹
B	۰/۹۹۹۵۱	۲۲	۰/۹۵۶	۰/۹۹۵۶۵	۳	۰/۷۵۲	۶۲۶	۰/۹۲۴۸۱	۱۲	۰/۹۵۲	۰/۹۹۹۳۳	۱۳	۳۱	۰/۹۴۳	۰/۹۶۷	۰/۹۹۸۴۹	۱۹

ادامه جدول ۱.

	پایین $2000cm^{-1}$							بالای $2000cm^{-1}$							کل فرکانسها			
Levels/	روش ۱			روش ۲				روش ۱			روش ۲				روش ۱			
basis set	R^2	SD	α	R^2	SD	β	α	R^2	SD	α	R^2	SD	β	α	R^2	SD	α	
C	۰/۹۹۸۵۳	۱۹	۰/۹۷۵	۰/۹۹۹۱۰	۱۵	۲۶	۰/۹۵۵	۰/۸۹۸۷۷	۱۳	۰/۹۵۳	۰/۹۹۴۲۷	۴	۷۰۳	۰/۷۲۷	۰/۹۹۹۲۹	۲۶	۰/۹۵۹	
D	۰/۹۹۸۹۴	۱۶	۰/۹۸۳	۰/۹۹۹۱۲	۱۵	۱۵	۰/۹۷۲	۰/۹۳۹۲۸	۱۰	۰/۹۵۹	۰/۹۹۴۵۴	۳	۵۶۷	۰/۷۷۶	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	۰/۷۸۲	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	۰/۷۸۶	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	۰/۷۳۹	۰/۹۹۹۳۱	۲۶	۰/۹۶۱	
H	۰/۹۹۸۸۷	۱۷	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۰۴	۱۶	۱۴	۰/۹۷۱	۰/۸۷۸۹۸	۱۵	۰/۹۵۰	۰/۹۸۸۹۳	۵	۷۴۴	۰/۷۱۲	۰/۹۹۸۹۶	۳۱	۰/۹۵۹	
I	۰/۹۹۹۱۲	۱۵	۰/۹۸۴	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۱۴	۰/۹۷۳	۰/۸۸۵۰۹	۱۴	۰/۹۵۱	۰/۹۸۹۴۳	۵	۷۲۹	۰/۷۱۸	۰/۹۹۹۰۱	۳۱	۰/۹۶۰	
J	۰/۹۹۷۳۵	۲۶	۰/۹۹۲	۰/۹۹۷۷۴	۲۴	۲۱	۰/۹۷۵	۰/۸۶۹۹۱	۱۵	۰/۹۵۴	۰/۹۸۸۲۳	۵	۷۶۴	۰/۷۰۹	۰/۹۹۸۳۹	۳۹	۰/۹۶۵	
K	۰/۹۹۸۸۱	۱۷	۰/۹۸۵	۰/۹۹۹۲۰	۱۵	۲۱	۰/۹۶۸	۰/۹۵۴۷۶	۹	۰/۹۵۹	۰/۹۹۶۱۷	۳	۵۰۴	۰/۷۹۷	۰/۹۹۹۲۸	۲۶	۰/۹۶۶	
MP2																		
A	۰/۹۹۱۴۹	۴۶	۰/۹۴۸	۰/۹۹۱۴۹	۴۷	−۳	۰/۹۵۰	۰/۹۱۰۵۴	۱۳	۰/۹۵۱	۰/۹۷۹۳۴	۷	۶۲۳	۰/۷۵۱	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	۰/۷۰۵	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	۰/۶۷۷	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	۰/۷۱۷	۰/۹۹۹۳۲	۲۵	۰/۹۵۲	
E	۰/۹۹۹۶۴	۹	۰/۹۷۳	۰/۹۹۹۶۸	۹	۷	۰/۹۶۸	۰/۸۷۴۵۱	۱۵	۰/۹۴۵	۰/۹۷۰۹۹	۸	۷۱۳	۰/۷۱۹	۰/۹۹۹۳۰	۲۶	۰/۹۵۳	
F	۰/۹۹۹۶۴	۹	۰/۹۷۴	۰/۹۹۹۷۰	۹	۹	۰/۹۶۷	۰/۸۷۲۷۵	۱۵	۰/۹۴۵	۰/۹۷۱۸۷	۸	۷۲۰	۰/۷۱۷	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	۰/۶۷۸	۰/۹۹۹۱۱	۲۹	۰/۹۳۹	
H	۰/۹۹۹۲۵	۱۴	۰/۹۶۰	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۶	۰/۹۵۶	۰/۷۰۷۴۴	۲۳	۰/۹۳۰	۰/۹۵۲۰۸	۱۰		۰/۶۱۷	۰/۹۹۹۰۳	۳۰	۰/۹۳۸	
I	۰/۹۹۹۰۶	۱۵	۰/۹۶۴	۰/۹۹۹۰۶	۱۶	۳	۰/۹۶۲	۰/۷۴۷۵۲	۲۱	۰/۹۳۲	۰/۹۶۰۵۸	۹	۹۵۲	۰/۶۳۴	۰/۹۹۸۹۳	۳۲	۰/۹۴۱	
J	۰/۹۹۹۲۸	۱۳	۰/۹۸۱	۰/۹۹۹۳۵	۱۳	۹	۰/۹۷۴	۰/۷۹۷۰۳	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	۰/۸۷۱۹۰	۱۵	۰/۹۵۷	۰/۹۰۵۲۵	۱۴	۴۷۹	۰/۸۰۳	۰/۹۹۹۲۵	۲۷	۰/۹۶۴	
MP3																		
D	۰/۹۹۸۷۶	۱۷	۰/۹۸۲	۰/۹۹۹۲۸	۱۴	۲۴	۰/۹۶۲	۰/۶۶۷۳۸	۲۴	۰/۹۵۸	۰/۸۳۶۸۰	۱۹	۹۲۳	۰/۶۶۱	۰/۹۹۹۲۲	۲۷	۰/۹۶۵	
B	۰/۹۹۸۳۲	۲۰	۰/۹۸۳	۰/۹۹۸۹۷	۱۶	۲۷	۰/۹۶۱	۰/۷۴۰۳۱	۲۱	۰/۹۵۷	۰/۸۳۶۶۳	۱۹	۷۵۳	۰/۷۱۵	۰/۹۹۹۱۰	۲۹	۰/۹۶۵	

[a] *A, B, C, D, E, F, G, H, I, J,* and *K* stand for *6-31G, 6-31G*, 6-31G**, 6-311G**, 6-311+G**, 6-311++G**, 6-31++G**, D95**, D95++**, cc-pVDZ,* and *cc-pVTZ* basis sets, respectively/.

جدول ۲- مقاددیر شدتهای تجربی و نظری مادون قرمز استون[a].

Frequency range(cm^{-1})											
Levels/basis sets	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	R^2	SD	α
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	۰/۹۸۷۳۷	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.

Frequency range(cm^{-1})												
Levels/basis sets	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	R^2	SD	α
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	۹۶۰۸۷	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	۰/۸۵۸–۰/۱۰۱
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.

Frequency range(cm^{-1})												
Levels/basis sets	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	R^2	SD	α
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}) 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	R^2	SD	α
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

همان طور که در (جدول-۲) دیده می‌شود نتایج به دست آمده از سطوح محاسباتیB3P86 ، B3PW91 و B972 با تابع پایه 6-31G* بهترین مقدار را برای R^2 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 می‌دهد که نتایج محاسبه شده با استفاده از سطوح DFT بسیار بهتر ازنتایج 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-C و همچنین زوایای CCC وCCO 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 به‌کار 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 می‌دهد 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 پیش‌بینی ممان دوقطبی استون نیز آورده شده است. مقادیر ممان دوقطبی محاسبه شده به طور کلی توافق خوبی با مقادیر تجربی دارد.

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	۱/۵۳۳	۱/۰۹۸–۱/۱۰۵	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
C	۱/۲۲۸	۱/۵۳۲	۱/۰۹۷–۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
D	۱/۲۲۱	۱/۵۳۲	۱/۰۹۵–۱/۱۰۱	۱۲۱/۸	۱۱۶/۴	۲/۷
E	۱/۲۲۴	۱/۵۳۰	۱/۰۹۶–۱/۱۰۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
F	۱/۲۲۴	۱/۵۳۱	۱/۰۹۶–۱/۱۰۲	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۳/۱
G	۱/۲۳۲	۱/۵۳۱	۱/۰۹۸–۱/۱۰۴	۱۲۱/۶	۱۱۶/۸	۳/۱
H	۱/۲۳۳	۱/۵۳۶	۱/۰۹۹–۱/۱۰۵	۱۲۱/۹	۱۱۶/۲	۲/۹
I	۱/۲۳۴	۱/۵۳۶	۱/۰۱۰–۱/۱۰۶	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
J	۱/۲۲۶	۱/۵۳۲	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	۱/۵۳۳	۱/۰۹۸–۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۵	۲/۷
C	۱/۲۲۷	۱/۵۳۲	۱/۰۹۷–۱/۱۰۳	۱۲۱/۷	۱۱۶/۵	۲/۷
D	۱/۲۲۰	۱/۵۳۱	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	۱/۵۳۰	۱/۰۹۷–۱/۱۰۳	۱۲۱/۶	۱۱۶/۹	۳/۱
H	۱/۲۳۲	۱/۵۳۵	۱/۰۹۸–۱/۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۱۶/۳	۲/۹
I	۱/۲۳۲	۱/۵۳۵	۱/۰۹۹–۱/۱۰۴	۱۲۱/۷	۱۱۶/۶	۳/۱
J	۱/۲۲۵	۱/۵۳۱	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

٤. 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 می شود که توابع پایه و سطوح محاسباتی مختلف در پیش بینی خواص مولکولی متفاوت یکسان عمل نمی کنند 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.