

### III-P-1.1

## NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT VỀ CẤU TRÚC VÀ ĐỘ BỀN CỦA ION METHYL FORMAT (CH<sub>3</sub>OCHO.+)

Phùng Quán

Khoa Hóa học, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

### Tóm tắt

Trong đề tài này chúng tôi nghiên cứu lý thuyết về cấu trúc và độ bền của ion methyl format và các đồng phân của ion methyl format bằng các phương pháp tính toán khác nhau HF, DFT, MP2. ... ở các trạng thái khác nhau như trạng thái nền cơ bản, hay trạng thái kích thích. Kết quả tính toán dùng để khảo sát phản ứng giữa ion methyl format với CF<sub>3</sub>Cl.

## THEORETICAL STUDY OF STRUCTURE AND STABLE ISOMER OF IONIZED METHYL FORMATE (CH<sub>3</sub>OCHO.+)

### Abstract

Theoretical study of structure and stable isomer of ionized methyl formate by computational chemistry : HF, DFT, MP2 .. in ground state and excited state. Calculation results would be used to study the reaction between ionized methyl formate with CF<sub>3</sub>Cl.