

Simuleringar av HCN polymerisation

SND-ID: 2022-38-1. **Version:** 1. **DOI:** <https://doi.org/10.5878/4ysr-8544>

Ladda ner data

gaussian_optimizations.zip (1.69 MB)

reference_state_simulations.zip (4.15 MB)

TS-simulations.zip (13.43 MB)

Ladda ner alla filer

2022-38-1-1.zip (~19.26 MB)

Citering

Sandström, H., & Rahm, M. (2023) Simuleringar av HCN polymerisation (Version 1) [Dataset]. Chalmers tekniska högskola. Tillgänglig via: <https://doi.org/10.5878/4ysr-8544>

Skapare/primärforskare

[Hilda Sandström](#) - Chalmers tekniska högskola

[Martin Rahm](#) - Chalmers tekniska högskola, Institutionen för kemi och kemiteknik

Forskningshuvudman

[Chalmers tekniska högskola](#) - Kemi och kemiteknik

Beskrivning

Forskningsprojektet ämnar till att kartlägga kinetiken och termodynamiken för de föreslagna första reaktionstegen i HCN polymerisation. Datasetet består av resultat från kvantkemiska beräkningar med Gaussian16 och input-filer till molekylodynamiksimuleringar med cp2k.

Följande mjukvaror och resurser användes: cp2k version 6.1, Gaussian16 och PLUMED version 2.5.

Se den engelska sidan och medföljande readme-filer för mer information.

Data innefattar personuppgifter

Nej

Språk

[Engelska](#)

Dataformat / datastruktur

[Numeriska](#)

Ansvarig institution/enhet

Kemi och kemiteknik

Finansiering

- Finansiär: Vetenskapsrådet

- Diarienummer hos finansiär: 2016-04127

Forskningsområde

[Teoretisk kemi](#) (Standard för svensk indelning av forskningsämnen 2011)

[Fysikalisk kemi](#) (Standard för svensk indelning av forskningsämnen 2011)

Nyckelord

[Polymerisation](#), [Molekyldynamik](#), [Vätecyanid](#)

Tillgänglighetsnivå

Åtkomst till data via SND

Data är fritt tillgängliga

Användning av data

[Att tänka på vid användning av data som delas via SND](#)

Versioner

Version 1. 2023-05-15

Kontakter för frågor om data

Hilda Sandström

hildasa@chalmers.se

Martin Rahm

martin.rahm@chalmers.se

Relaterade forskningsdata i SND:s katalog

[Teoretisk studie kring bildning av iminoacetonitril](#)

Ladda ner metadata

[DataCite](#)

[DDI 2.5](#)

[DDI 3.3](#)

[DCAT-AP-SE 2.0](#)

[JSON-LD](#)

[PDF](#)

[Citering \(CLS\)](#)

[Filöversikt \(CSV\)](#)

Publicerad: 2023-05-15