

## 研究简报

### BeH<sub>2</sub>与HX(X=F, Cl, Br, I)形成的二氢键复合物的结构特征与本质

刘红; 陈燕芹

贵州毕节学院化学系, 贵州 毕节 551700

#### 摘要:

对BeH<sub>2</sub>与HX(X=F, Cl, Br, I)形成的二氢键复合物的结构特征及本质进行了探讨. 在MP2/6-311++G(3d,3p)水平优化、频率验证, 得到复合物的分子结构, 用分子间距离及电子密度拓扑理论确认BeH<sub>2</sub>与卤化氢已形成了二氢键型复合物. 在MP2/6-311++G(3d, 3p)水平下进行基函数重叠误差(BSSE)校正后的结合能在-14.468 kJ·mol<sup>-1</sup>到-5.464 kJ·mol<sup>-1</sup>之间. 用对称匹配微扰理论(SAPT)对复合物的结合能进行分解, 结果表明, BeH<sub>2</sub>...HX二氢键复合物中静电能对总吸引能的贡献都是最主要的, 但交换排斥能、诱导能、色散能对总结合能的贡献也很重要. 从BeH<sub>2</sub>...HF到BeH<sub>2</sub>...HI, 诱导能对总吸引能的贡献从37.8%逐渐减小到24.0%. 而色散能对总吸引能的贡献从BeH<sub>2</sub>...HF体系中的16.0%逐渐增加到BeH<sub>2</sub>...HI体系中的33.8%.

关键词: 二氢键 SAPT BeH<sub>2</sub> 卤化氢

收稿日期 2007-06-12 修回日期 2007-07-15 网络版发布日期 2007-09-21

通讯作者: 刘红 Email: hliu315@126.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(283KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友  
加入我的书架  
加入引用管理器  
引用本文  
Email Alert  
文章反馈  
浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 二氢键  
▶ SAPT  
▶ BeH<sub>2</sub>  
▶ 卤化氢

本文作者相关文章

▶ 刘红  
▶ 陈燕芹