

气相中O₃与HSO自由基间的氢键复合物

袁焜; 刘艳芝; 朱元成; 张继

天水师范学院生命科学与化学学院, 甘肃 天水 741000; 西北师范大学化学化工学院, 兰州 730070

摘要:

气相中O₃与HSO自由基之间的相互作用及其反应在大气化学中非常重要. 在DFT-B3LYP/6-311++G**和MP2/6-311++G**水平上求得O₃+HSO复合物势能面上的稳定构型, B3LYP方法得到了三种构型(复合物I, II和III), 而MP2方法只能得到一种构型(复合物II). 在复合物I和III中, HSO单元中的1H原子作为质子供体, 与O₃分子中的端基O原子作为质子受体相互作用, 形成红移氢键复合物; 而在复合物II中, 虽与复合物I和III中具有相同的质子供体和质子受体, 却形成了蓝移氢键复合物. B3LYP/6-311++G**水平上计算的单体间相互作用能的计算考虑了基组重叠误差(BSSE)和零点振动能(ZPVE)校正, 其值在-3.37到-4.55 kJ·mol⁻¹之间. 采用自然键轨道理论(NBO)对单体间相互作用的本质进行了考查, 并通过分子中原子理论(AIM)分析了三种复合物中氢键的电子密度拓扑性质.

关键词: HSO自由基 臭氧 氢键相互作用 自然键轨道理论 分子中原子理论

收稿日期 2008-06-17 修回日期 2008-08-04 网络版发布日期 2008-09-30

通讯作者: 袁焜 Email: yuankun@mail.tsnc.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1190KB\)](#)

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

▶ [HSO自由基](#)

▶ [臭氧](#)

▶ [氢键相互作用](#)

▶ [自然键轨道理论](#)

▶ [分子中原子理论](#)

本文作者相关文章

▶ [袁焜](#)

▶ [刘艳芝](#)

▶ [朱元成](#)

▶ [张继](#)