

## HOCl...HCOCI复合物的结构和电子性质

刘艳芝 何丽红 袁焜 吕玲玲 王云普

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:

在DFT-B3LYP/6-311++G\*\*水平上求得HOCl+HCOCI复合物势能面上的四种稳定构型(S1, S2, S3和S4). 其中, 在复合物S1和S3中, HOCl单体的5H原子作为质子供体, 与HCOCI单体中作为质子受体的1O原子相互作用, 形成红移氢键复合物; 在复合物S4中, HOCl单体的7Cl原子作为质子供体, 与HCOCI单体中作为质子受体的1O原子相互作用, 形成红移卤键复合物; 而在复合物S2中, 同时存在2C—3H...6O蓝移氢键和4Cl...5O相互作用. 在MP2/6-311++G\*\*水平上计算的单体间的相互作用能考虑了基组重叠误差(BSSE)和零点振动能(ZPVE)校正, 其值在-5.05与-14.76 kJ·mol<sup>-1</sup>之间. 采用自然键轨道理论(NBO)对两种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)分析了复合物中氢键和卤键键鞍点处的电子密度拓扑性质.

关键词: 次氯酸 氯代甲醛 非共价相互作用 自然键轨道理论 分子中原子理论

收稿日期 2008-03-13 修回日期 2008-05-24 网络版发布日期 2008-07-17

通讯作者: 刘艳芝 Email: lianzhi003@163.com

### 本刊中的类似文章

1. 袁焜; 刘艳芝; 吕玲玲; 马伟超. (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>S与HOCl分子间的卤键和氢键相互作用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1257-1263

### 扩展功能

#### 本文信息

[PDF\(1427KB\)](#)

[英文版PDF \(1071KB\)](#)

#### 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

- ▶ [次氯酸](#)
- ▶ [氯代甲醛](#)
- ▶ [非共价相互作用](#)
- ▶ [自然键轨道理论](#)
- ▶ [分子中原子理论](#)

#### 本文作者相关文章

- ▶ [刘艳芝](#)
- ▶ [何丽红](#)
- ▶ [袁焜](#)
- ▶ [吕玲玲](#)
- ▶ [王云普](#)