

引用信息: ZHAO Ying; ZENG Yan-Li; ZHANG Xue-Ying; ZHENG Shi-Jun; MENG Ling-Peng. Acta Phys. -Chim. Sin., 2006, 22(12): 1526-1531 [赵影; 曾艳丽; 张雪英; 郑世钧; 孟令鹏. 物理化学学报, 2006, 22(12): 1526-1531]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 研究论文

### 乙烯、乙炔与双卤分子间 $n$ 型卤键的电子密度拓扑研究

赵影; 曾艳丽; 张雪英; 郑世钧; 孟令鹏

(河北师范大学化学与材料科学学院, 计算量子化学研究所, 石家庄 050016; 河北农业大学理学院, 河北 保定 071001)

#### 摘要:

运用DFT和MP2(full)在6-311++G(d, p)和aug-cc-pvdz基组水平上, 对一系列简单的分子间 $n$ 型卤键体系 $C_2H_4(C_2H_2)-XY(XY= F_2, Cl_2, Br_2, ClF, BrF, BrCl)$ 进行构型全优化, 得到了T型卤键复合物. 结果表明MP2(full)/6-311++G(d, p)计算结果与实验结果较吻合. 并在MP2水平上计算了分子间的相互作用能, 用标准Counterpoise procedure (CP)方法对基函数迭加误差(BSSE)进行了校正. 利用电子密度拓扑分析方法对卤键复合物的拓扑性质进行了分析研究.

关键词:  $n$ 型卤键 电子密度拓扑分析 MP2 双卤分子

收稿日期 2006-06-29 修回日期 2006-08-18 网络版发布日期 2006-12-06

通讯作者: 孟令鹏 Email: menglp@mail.hebtu.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(1051KB)

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

▶  $n$ 型卤键

▶ 电子密度拓扑分析

▶ MP2

▶ 双卤分子

本文作者相关文章

▶ 赵影

▶ 曾艳丽

▶ 张雪英

▶ 郑世钧

▶ 孟令鹏