

PH~3...H~2O体系分子间相互作用的从头计算MO研究

张愚,王一波,孙泽民,田安民

贵州大学化学系,贵州;四川大学化学系,成都(610064)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在MP2/6-311++G(3d,3p)水平,对PH~3...H~2O体系可能存在的氢键复合物进行了全自由度能量梯度优化,发现PH~3...H~2O体系存在三个能量极小结构A,B和C。其中结构A和B以H~2O作为质子授体,结构C以PH~3作为质子授体,结构A较结构B和C分别稳定6.52kJ/mol和8.18kJ/mol。结构A具有C~s对称性,其结构中P原子和O原子间距离为354.78nm,键角OHP为171.35iii,属于接近于直线的传统型氢键结构。进一步在高级电子相关校正的MP4SDTQ下,用6-311++G(3df,3pd)基加上键函数{3s3p2d1f},通过BSSE校正,精确计算了结构A的结合能为-10.84kJ/mol。

关键词 [从头计算法](#) [氢键](#) [相互作用](#) [磷化氢](#) [水](#)

分类号 [064](#)

Ab initio MO study on the PH~3...H~2O complexes

Zhang Yu,Wang Yibo,Sun Zemin,Tian Anmin

Guizhou Univ., Dept of Chem.Guizhou;Sichuan Univ, Dept Chem. Chengdu(610064)

Abstract The intermolecular geometry of the weak hydrogen-bonded complex PH~3. ..H~2O was optimized using the second-order Moller-Plesset perturbation theory (MP2) at 6-311++G (3d, 3p) level. Three equilibrium structures (A, B and C) was found. The geometry A, which exhibits the conventional structural features of a hydrogen-bonded system with H~2O as the proton donor, is the most stable one in the three equilibrium structures. Using the geometry A, which has C~s symmetry and R(P...O)=354.78nm, correlation energy has been calculated with 6-311++G(3df, 3pd) basis set adding bond function {3s3p2d1f} using MP2, and MP4SDTQ. The computed binding energy is -10. 84kJ/mol at MP4SDTQ level.

Key words [AB INITIO CALCULATION](#) [HYDROGEN BONDS](#) [INTERACTIONS](#) [PHOSPHOROUS HYDRIDE](#) [WATER](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(425KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“从头计算法”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [张愚](#)
- [王一波](#)
- [孙泽民](#)
- [田安民](#)