

研究论文

(CH₂)₂O, (CH₂)₂S与双卤分子间卤键的理论研究

张雪英 曾艳丽 李晓艳 孟令鹏 郑世钧*

(河北师范大学 计算量子化学研究所 石家庄 050016)

收稿日期 2008-7-25 修回日期 2008-10-31 网络版发布日期 2009-6-18 接受日期 2008-12-15

摘要

运用量子化学密度泛函B3LYP方法, 采用6-311++G(d,p)及aug-cc-pVDZ基组, 通过CP校正的几何梯度优化对(CH₂)₂O和(CH₂)₂S与双卤分子XY (XY=Cl₂, Br₂, ClF, BrF, BrCl)形成的卤键复合物的几何构型、振动频率和相互作用能等进行了研究. 利用电子密度拓扑分析理论方法对卤键复合物的拓扑性质进行了分析研究, 探讨了该类分子间卤键的作用本质. 结果表明, (CH₂)₂O和(CH₂)₂S与双卤分子间的卤键介于共价键与离子键之间, 偏于静电作用成分为主. 形成卤键后, 双卤分子的键长增加, 振动频率减小, 原子积分性质发生改变. 卤键键长的变化、键能的强弱、键鞍点处的电子密度值与双卤分子的电负性有关.

关键词 [分子间相互作用](#) [卤键](#) [B3LYP](#) [电子密度拓扑分析](#)

分类号

DOI:

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(385KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子间相互作用”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- ▶ [张雪英,曾艳丽,李晓艳,孟令鹏,郑世钧](#)

通讯作者:

郑世钧 sjzheng@mail.hebtu.edu.cn

作者个人主页:

张雪英 曾艳丽 李晓艳 孟令鹏 郑世钧*