

# BH<sub>2</sub> 的分子结构和势能函数

阎世英<sup>†</sup>

(青岛大学物理科学学院, 青岛 266071)

(2005 年 6 月 24 日收到, 2005 年 12 月 20 日收到修改稿)

采用密度泛函理论(DFT)的 B3P86 方法和相对论有效原子实势理论模型(RECP),对 BH<sub>2</sub>, BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 分子进行了优化,得到这些分子基态的电子状态分别是<sup>2</sup>A', <sup>3</sup>A', <sup>3</sup>A". 计算也得到了 BH<sub>2</sub> 的分子结构和势能函数,它的离解能是 7.752eV, BH<sub>2</sub> 分子具有 C<sub>2v</sub> 对称性,由微观可逆性原理,判断了 BH<sub>2</sub> 分子的离解极解,并且导出了 BH<sub>2</sub> 分子的多体项展式势能函数,其势能面等值图展现了 H-B-H 的结构,这些结果可以用于 BH<sub>2</sub> 分子的微观反应动力学.

关键词: BH<sub>2</sub>, 分子结构, 势能函数

PACC: 3420, 3520G

## 1. 引 言

硼的离子团簇和富硼材料的理论和实验方面的研究目前都十分活跃,但是研究成果仍然很有限,这与硼为元素周期表中化学性质最令人感兴趣元素之一的地位甚不相称<sup>[1]</sup>. 硼和富硼材料在工程上有重要的应用价值,例如爆炸、材料精炼与提纯、高弹纤维混合物、化学性质稳定的绝缘体等方面都要涉及到它们. 它也是一种令人感兴趣的火箭推进剂. 从理论上讲,硼看起来是一个简单体系,实际上对它的处理却相当困难. 仅仅关于 B<sub>2</sub> 分子的基电子态的多重性是 3 还是 5,就争论了很久才确定下来<sup>[2]</sup>. 关于 BH<sub>2</sub>, BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 结构的实验数据到目前为止仍然没有发现,理论计算也极为少见<sup>[3]</sup>,所以提供 BH<sub>2</sub>, BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 结构的数据,对硼的离子团簇和富硼材料的研究十分必要.

本文采用 Gaussian03 程序<sup>[4]</sup>,利用 B3P86, BP86, B3LYP, BLYP, UHF, HF 及 LSDA 等方法,分别对 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子进行了优化, BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子的电子状态分别是<sup>2</sup>A', <sup>3</sup>A', <sup>3</sup>A", 其构型如图 1、2 和 3 所示,分别对应最低能量. 密度泛函方法处理分子结构已经有不少成功的例子<sup>[5-7]</sup>. 本文用密度泛函方法计算了 BH<sub>2</sub> 分子、

BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子.

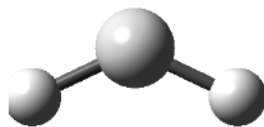


图 1 BH<sub>2</sub> 的几何构型

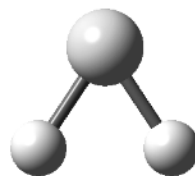


图 2 BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 的几何构型

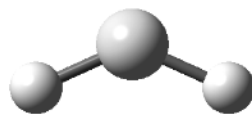


图 3 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 的几何构型

## 2. 理论和计算方法

分别采用 HF 分子轨道理论和密度泛函 DFT 方

<sup>†</sup> E-mail: ysy5954418@163.com

法在 6-311++G(d,p) 基组水平上对 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子进行全构型能量梯度优化. HF 分子轨道理论与密度泛函理论(density functional theory, DFT) 的区别在于前者优化波函数, 而后者优化电荷密度. 密度泛函理论方法就是通过构造电荷密度的泛函来模拟电子相关的一种近似方法, 将电子能量分成动能、电子-核吸引能和 Coulomb 排斥能以及交换-相关项几部分分别计算, 即电子的能量可分成

$$E = E^T + E^V + E^J + E^{XC}, \quad (1)$$

其中,  $E^T$  为电子运动的动能,  $E^V$  包括核与电子的吸引势和核与核的排斥势,  $E^J$  为电子与电子的排斥势,  $E^{XC}$  为交换相关能和电子与电子相互作用的其余部分. 除了核与核的排斥势外, 每一项均可表示为电荷密度  $\rho$  的函数, 如  $E^J$  可表示为

$$E^J = \frac{1}{2} \iint \rho(\mathbf{r}_1) \chi(\Delta r_{12})^{-1} \rho(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (2)$$

$E^T + E^V + E^J$  与电荷分布的经典能量相对应, 其解析表达式较容易写出, 而  $E^{XC}$  是指反对称波函数的交换能, 和单电子运动的动力学相关. Hohenberg 和 Kohn<sup>[8]</sup> 认为  $E^{XC}$  由电荷密度所确定, 通常可近似认为是仅包括电荷密度  $\rho$  和其可能的梯度  $\nabla\rho$  的积分, 即

$$E^{XC}[\rho] = \int f(\rho_\alpha(\mathbf{r}), \rho_\beta(\mathbf{r}), \nabla\rho_\alpha(\mathbf{r}), \nabla\rho_\beta(\mathbf{r})) d^3\mathbf{r}. \quad (3)$$

总的电荷密度  $\rho$  为  $\alpha$  自旋的密度  $\rho_\alpha$  和  $\beta$  自旋的密度  $\rho_\beta$  之和. 为了写出其具体的解析表达式, 将  $E^{XC}$  分为交换和相关两个独立的部分(分别对应于相同自旋和混合自旋相互作用)

$$E^{XC}[\rho] = E^X[\rho] + E^C[\rho], \quad (4)$$

式中的三项均为电荷密度的泛函,  $E^X[\rho]$  和  $E^C[\rho]$  两项分别为交换泛函和相关泛函, 均由仅与电荷密度  $\rho$  有关的局域泛函(local functional) 和与电荷密度  $\rho$  及其梯度  $\nabla\rho$  有关的梯度修正泛函(gradient-corrected functionals) 组成. 1988 年 Becke 给出了基于局域的交换泛函形式<sup>[9]</sup>

$$E_{\text{Becke88}}^X = E_{\text{LDA}}^X - \gamma \int \frac{\rho^{4/3} x^2}{(1 + 6\gamma \text{sh}^{-1} x)} d^3\mathbf{r}, \quad (5)$$

$$E_{\text{LDA}}^X = -\frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \int \rho^{4/3} d^3\mathbf{r}, \quad (6)$$

其中  $\rho$  是  $r$  的函数,  $x = \rho^{-4/3} |\nabla\rho|$ ,  $\gamma$  是被选择拟合已知原子的交换能的参数, Becke 定义其值为 0.0042 Hartree a.u.. 类似地, 1991 年 Perdew 和 Wang

提出了一种相关泛函的形式

$$E^C = \int \rho \varepsilon_c(r_s(\rho(\mathbf{r})), \zeta) d^3\mathbf{r}, \quad (7)$$

式中  $\varepsilon_c(r_s, \zeta) = \varepsilon_c(\rho, 0) + a_c(r_s) \frac{f(\zeta)}{f(0)} (1 - \zeta^4) + [(\varepsilon_c(\rho, 1) - \varepsilon_c(\rho, 0))] f(\zeta) \zeta^4$ , 其中

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho}\right)^{1/3},$$

$$\zeta = \frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{\rho_\alpha + \rho_\beta},$$

$$f(\zeta) = \frac{[(1 + \zeta)^{4/3} + (1 - \zeta)^{4/3} - 2]}{(2^{4/3} - 2)}.$$

$r_s$  是密度参数,  $\zeta$  是相关自旋极化. DFT 方法就是将交换泛函和相关泛函联合起来进行计算, 本文所用的 B3LYP 方法即是包含梯度修正的 Becke 交换泛函和包含梯度修正的 Lee, Yang 和 Parr 相关泛函联系在一起, 局域相关泛函按常规采用 Vosko, Wilk 和 Nusair(VWN) 局域自旋密度处理, 得到 Becke 三参数的泛函

$$E_{\text{XC}}^{\text{B3LYP}} = E_{\text{XC}}^{\text{LDA}} + c_0(E_X^{\text{HF}} - E_X^{\text{LDA}}) + c_X \Delta E_X^{\text{BS88}} + (1 - c_C) E_C^{\text{VWN}} + c_C E_C^{\text{LYP}}. \quad (8)$$

通过调节参数  $c_0$ ,  $c_X$  和  $c_C$  的值, 可以优化控制交换能和相关能修正, Becke 通过在 G1 理论上对第一周期原子的原子化能、电离势、质子亲和能和原子能量进行拟合, 得到参数的值分别为  $c_0 = 0.20$ ,  $c_X = 0.72$  和  $c_C = 0.81$ . 用类似于自洽场方法(SCF) 的迭代方式进行自洽的 DFT 计算. 为了提供较好的相关轨道, 计算体系的总的相关能(即包括原子内层电子的相关能), 对 B 和 H 采用了极化函数加上扩散函数后的 3- $\zeta$  分裂价扩展基组 6-311++G(d,p). 所谓 G1 理论是 Gaussian 程序里非常精确的计算分子能量的一种方法, 它是通过观察某些从头计算方法系统误差的趋势产生的, 用于预测某些分子基态的能量, 建立修正方程, 使用了从几个不同的从头计算得到的能量, 用来外推非常高精度的结果. 此外, 还有 G2, G3 方法.

## 3. 结果与讨论

### 3.1. BH<sub>2</sub> 分子的结构与光谱数据

采用 Gaussian03 程序中 B3P86, BP86, B3LYP, BLYP, UHF, HF 及 LSDA 等方法, 分别对 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子进行了优化, 表 1 分别是对 BH<sub>2</sub>

分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子能量的优化结果 ,BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子的电子状态分别是<sup>2</sup>A',<sup>3</sup>A',

<sup>3</sup>A'' 同时表 1 分别也列出了文献 [3] 对 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子能量的部分优化结果 . 利用

表 1 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子能量优化结果/H. a. u.

	多重性	HF	UHF	LSDA	BLYP	B3LYP	BP86	B3P86
本文 BH <sub>2</sub>	2	-25.7576	-25.7576	-25.7365	-25.9179	-25.9437	-25.9292	-26.0604
文献 [3] BH <sub>2</sub>					-25.9186	-25.9446	-25.9299	-26.0613
本文 BH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	3	-25.3389	-25.3389	-25.2742	-25.4716	-25.4892	-25.4795	-25.5892
文献 [3] BH <sub>2</sub> <sup>+</sup>					-25.6170	-25.6210	-25.6203	-25.7344
本文 BH <sub>2</sub> <sup>-</sup>	3	-25.7420	-25.7420	-25.7741	-25.9266	-25.9544	-25.9489	-26.0931
文献 [3] BH <sub>2</sub> <sup>-</sup>					-25.9045	-25.9342	-25.9241	-26.0704

B3P86 方法 , 它们的其他结构参数的优化结果和文献 [3] 的资料见表 2 , 其中 BH<sub>2</sub> 分子的离解能是 7.752eV .

表 2 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 结构参数

电子状态	键角(°)	键长/nm
本文 BH <sub>2</sub> <sup>2</sup> A'	∠HBH = 129.4	R <sub>BH</sub> = 0.11899 R <sub>BH</sub> = 0.21514
文献 [3] BH <sub>2</sub>	∠HBH = 129.3	R <sub>BH</sub> = 0.11860
本文 BH <sub>2</sub> <sup>+</sup> <sup>3</sup> A'	∠HBH = 66.9	R <sub>BH</sub> = 0.12896
文献 [3] BH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	∠HBH = 180.0	R <sub>BH</sub> = 0.1173
本文 BH <sub>2</sub> <sup>-</sup> <sup>3</sup> A''	∠HBH = 130.6	R <sub>BH</sub> = 0.12037
文献 [3] BH <sub>2</sub> <sup>-</sup>	∠HBH = 98.2	R <sub>BH</sub> = 0.12630

从表 1 可以看出我们对能量的计算结果与文献 [3] 的结果几乎没有差别 , 同时 , 从表 2 可以发现对键长的计算结果与文献 [3] 的结果也没有差别 , 但是 , 对键角的计算却不一样 . 由于没有实验资料可作对比 , 无法判断其正确性 , 只能作为参考 .

利用 B3P86 方法 , BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 离子的力常数列于表 3 .

表 3 BH<sub>2</sub> 分子、BH<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 BH<sub>2</sub><sup>-</sup> 的力常数

	f <sub>11</sub>	f <sub>22</sub>	f <sub>33</sub>	f <sub>12</sub>	f <sub>13</sub>	f <sub>23</sub>
BH <sub>2</sub>	0.24819	0.24819	0.08094	0.00238	0.01237	0.01237
BH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.13384	0.13384	0.082370	0.02349	-0.00881	-0.00885
BH <sub>2</sub> <sup>-</sup>	0.22386	0.22386	0.07055	0.00052	0.01512	0.01510

### 3.2. BH 分子和 H<sub>2</sub> 分子的势能函数和光谱数据

采用 Murrell-Sorbie 势能函数形式<sup>[10,11]</sup> :

$$E(\rho) = -De(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (9)$$

式中  $\rho = R - R_e$  , R 为核间距 , R<sub>e</sub> 为平衡核间距 , De 为离解能 , a<sub>1</sub> , a<sub>2</sub> , a<sub>3</sub> 为一、二、三次项系数 , 它们可以被拟合得到 , BH 和 H<sub>2</sub> 的双体项参数和光谱数据见表 4 和表 5 .

表 4 BH 和 H<sub>2</sub> 的双体项参数

分子	De/eV	R <sub>e</sub> /nm	a <sub>1</sub> /0.1nm <sup>-1</sup>	a <sub>2</sub> /0.1nm <sup>-2</sup>	a <sub>3</sub> /0.1nm <sup>-3</sup>
BH	5.8054	1.2401	1.8497	-0.1773	0.7625
H <sub>2</sub>	7.9297	0.7453	2.4248	-0.0414	1.8760

表 5 BH 和 H<sub>2</sub> 分子的光谱数据及力常数

分子	f <sub>2</sub> /aJ·nm <sup>-2</sup>	f <sub>3</sub> /aJ·nm <sup>-3</sup>	f <sub>4</sub> /aJ·nm <sup>-4</sup>	α <sub>e</sub> /cm <sup>-1</sup> ·10 <sup>-1</sup>	ω <sub>e</sub> χ <sub>e</sub> /cm <sup>-1</sup>	B <sub>e</sub> /cm <sup>-1</sup>	ω <sub>e</sub> /cm <sup>-1</sup>
BH	3.5123	-17.8587	70.9200	3.6752	52.3318	11.8892	2542.74
H <sub>2</sub>	7.5752	-51.2924	274.1788	29.3825	168.1514	60.2149	5050.76

### 3.3. 基态 BH<sub>2</sub> 分子的多体项分析势能函数

三原子分子的分析势能函数(势能面)是研究原子分子碰撞反应动力学的基础 , 它是三维空间的一个曲面 , 基态 BH<sub>2</sub> 分子属于 C<sub>2v</sub> 构型 , 由原子分子静力学原理 , 其离解极限为

$$BHH(^2A') \rightarrow \begin{cases} H(^2P_u) + 2H(^2S_g), \\ H(^2P_u) + H_2(^1\Sigma_g^+), \\ BH(^1\Sigma_g^+) + H(^2S_g). \end{cases} \quad (10)$$

设原子基态能量为零 , 满足离解极限(10)式的多体项分析势能函数为<sup>[10]</sup>

$$V(R_1, R_2, R_3) = V_{HH}^{(2)}(R_1) + V_{BH}^{(2)}(R_2) + V_{BH}^{(2)}(R_3) + V_{BHH}^{(3)}(R_1, R_2, R_3), \quad (11)$$

式中  $V_{\text{BH}}^{(2)}(R_2)$  和  $V_{\text{HH}}^{(2)}(R_3)$  为基态双原子分子的双体项势能函数, 本文采用 Murrell-Sorbie 势能函数形式, 势能函数参数见表 4.  $V_{\text{BHH}}^{(3)}(R_1, R_2, R_3)$  为三体项势能函数, 采用形式为<sup>[10]</sup>

$$V_{\text{BHH}}^{(3)}(R_1, R_2, R_3) = P \cdot T, \quad (12)$$

式中  $P$  为优化内坐标  $S$  的多项式,  $T$  为量程函数, 其形式分别为

$$P = C_0 + C_1 S_1 + C_2 S_2 + C_3 S_2^2 + C_4 S_3^2 + C_5 S_1 S_2 + C_6 S_3^4 + C_7 S_1^2 + C_8 S_1 \cdot (S_2^2 + S_3^2) + C_9 S_2 S_3^2, \quad (13)$$

$$T = [1 - \tan(\gamma_1 S_1/2)] \cdot [1 - \tan(\gamma_2 S_2/2)] \cdot [1 - \tan(\gamma_3 S_3/2)]. \quad (14)$$

为了方便地研究势能函数, 根据势能面的结构特征, 采用优化内坐标. 对于三体项, 取  $\text{BHH}(^2A')$

$$\begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix} \quad (15)$$

的两个平衡键长为参考结构,  $R_1^0 = R_{\text{HH}}^0 = 0.21514\text{nm}$ ,  $R_2^0 = R_3^0 = R_{\text{BH}}^0 = 0.11899\text{nm}$ , 故内坐标  $\rho_i$  经上述变换而成为优化内坐标  $S_i$ , 式中  $\rho_i = R_i - R_i^0$  ( $i = 1, 2, 3$ ).

(13) 和 (14) 式中共有 10 个线性系数  $C_i$  和三个非线性系数  $\gamma_i$ . 线性系数  $C_i$  由 10 个已知条件 (BH<sub>2</sub> 的离解能、三个一阶力常数和六个二阶力常数) 确定, 对于非线性系数  $\gamma_i$  通过对全势能表面进行非线性优化确定, 计算得到的分析势能函数参数见表 6.

表 6 BH<sub>2</sub> 分子分析势能函数参数

$C_0 = 10.0141$	$C_1 = 5.0357$	$C_2 = 5.5151$
$C_3 = -5.9497$	$C_4 = 4.7830$	$C_5 = 4.2976$
$C_6 = 8.1330$	$C_7 = 5.9680$	$C_8 = 1.4472$
$C_9 = -7.3655$		
$\gamma_1 = 1.7$	$\gamma_2 = 2.1$	$\gamma_3 = 0$

根据分析势能函数参数绘制的 BH<sub>2</sub> 分子的等值势能图如图 4 和图 5, 图 4 是固定  $\angle\text{HBH} = 129.4^\circ$  时, 表现的 H—B 键对称伸缩振动势能图, 在平衡点 ( $R_2 = R_3 = 0.11899\text{nm}$ ), 准确地再现了 BH<sub>2</sub> 分子的离解能是 7.752eV, 构型是  $C_{2v}$  结构, 与优化结果一致.

图 5 是固定 H—B 键在横轴上, 让 H 绕 H—B 键旋转的等值势能图, 从图中可以看出, 第一个极小点对应于  $\angle\text{HBH} = 129.4^\circ$ ,  $R_{\text{BH}} = 0.11899\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} =$

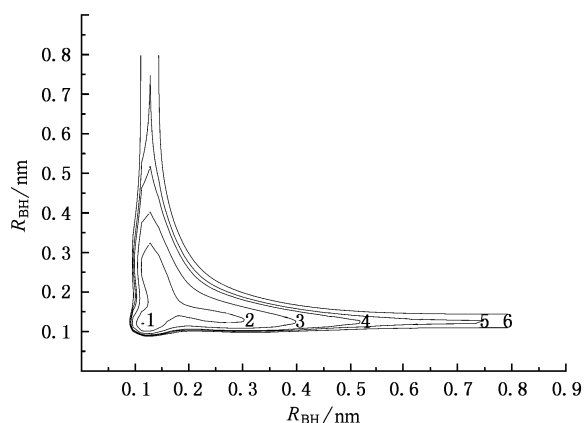


图 4 BH<sub>2</sub> 分子的伸缩振动等值势能图 (曲线 1—6 分别为 7.75, 7.1, 6.5, 6.0, 5.8, 5.5eV)

0.21514nm, BH<sub>2</sub> 分子的离解能是 7.752eV. 第二个极小点对应于  $\angle\text{HBH} = 179.9^\circ$ ,  $R_{\text{BH}} = 0.12409\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} = 0.22771\text{nm}$ , BH<sub>2</sub> 分子的离解能是 5.357eV. 两个极小点之间存在一个鞍点, 其能量是 4.4eV, 即 H 要发生内迁移需要翻越能垒为 0.957 eV, 形成次稳定的 BH<sub>2</sub> 分子, 与优化结果一致, 说明我们得到的分析势能函数式, 正确地反映了 BH<sub>2</sub> 分子的结构特征.

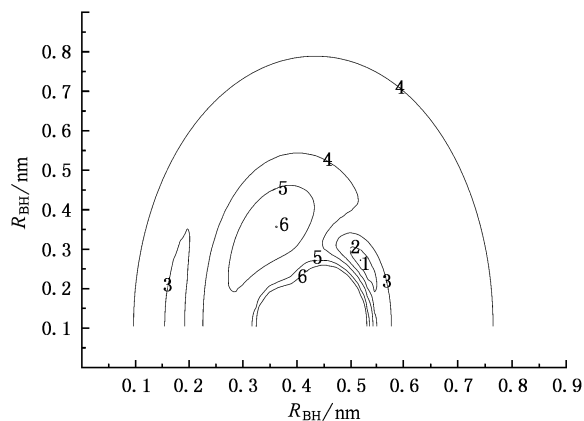


图 5 BH<sub>2</sub> 分子的旋转等值势能图 (曲线 1—6 分别为 7.75, 7.6, 7.2, 6.6, 5.5 和 4.4eV)

## 4. 结 论

用 B3P86 密度泛函方法计算了 BH<sub>2</sub> 分子的结构和势能函数, 结果表明 BH<sub>2</sub> 分子的电子状态是  $^2A'$ , 离解能是 7.752eV, 该分子具有  $C_{2v}$  结构, 对应于  $\angle\text{HBH} = 129.4^\circ$ ,  $R_{\text{BH}} = 0.11899\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} =$

0.21514nm, 是它的基态, 还存在另外一个次稳定的结构, 极小点对应于  $\angle\text{HBH} = 179.9^\circ$ ,  $R_{\text{BH}} = 0.12409\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} = 0.22771\text{nm}$ , 对应的离解能是 5.357eV. 两个极小点之间存在一个鞍点, 其能量是 4.4eV, 即 H 要发生内迁移需要翻越能垒为 0.957

eV, 形成次稳定的  $\text{BH}_2$  分子, 与优化结果一致, 说明我们得到的分析势能函数式, 正确地反映了  $\text{BH}_2$  分子的结构特征. 这些计算结果可以进一步用于  $\text{BH}_2$  分子的微观反应动力学研究. 对硼的离子团簇和富硼材料的研究十分必要.

- [ 1 ] Niu J, Rao B K, Jena P 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 132  
 [ 2 ] Bruna P J, Wright J S 1990 *J. Phys. Chem.* **94** 1774  
 [ 3 ] Jursic B S 2000 *Journal of Molecular Structure*( Theochem ) **505** 67  
 [ 4 ] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B *et al* 1998 Gaussian 98 Revision A.9( Pittsburgh PA : Gaussian Inc )  
 [ 5 ] Yan S Y, Zhu Z H 2004 *Chin. Phys.* **13** 2053  
 [ 6 ] Wang H Y, Zhu Z H 2003 *Chin. Phys.* **12** 154  
 [ 7 ] Yan S Y, Ma M Z, Zhu Z H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 37 ( in

- Chinese ] 阎世英、马美仲、朱正和 2005 物理学报 **54** 37 ]  
 [ 8 ] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev.* **136** B 864  
 [ 9 ] Becke A D 1988 *Phys. Rev. A* **38** 3098  
 [ 10 ] Zhu Z H, Yu H G 1997 *Molecular Structure, Molecular Potential Energy Function*( Beijing : Science Press ) [ 朱正和、俞华根 1997 分子结构与分子势能函数( 北京 : 科学出版社 ) ]  
 [ 11 ] Murrell J N, Carter S, Farantos S C *et al* 1984 *Molecular Potential Energy Function*( John Wiley : Sons Ltd. M )

## The molecular structure and potential energy function of the ground state of $\text{BH}_2$ molecule

Yan Shi-Ying<sup>†</sup>

( College of Physical Science, Qingdao University, Qingdao 266071, China )

( Received 24 June 2005 ; revised manuscript received 20 December 2005 )

### Abstract

The density function( B3P86 ) method with relativistic effective core potential has been used to optimize the structure of the ground state of  $\text{BH}_2$ ,  $\text{BH}_2^+$  and  $\text{BH}_2^-$  molecules or ions, which are angular H-B-H, whose equilibrium nuclear distance and dissociation energy respectively are  $R_{\text{BH}} = R_{\text{BH}} = 0.11899\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} = 0.21514\text{nm}$ , and 7.752eV ;  $R_{\text{BH}} = R_{\text{BH}} = 0.12896\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} = 0.14223\text{nm}$  ;  $R_{\text{BH}} = R_{\text{BH}} = 0.12037\text{nm}$ ,  $R_{\text{HH}} = 0.21087\text{nm}$ . The analytic potential energy function of the ground state of  $\text{BH}_2(^2A')$  has been derived by the many-body expansion theory using the equilibrium geometry structure parameters, dissociation energy and force constants, which is successfully used for describing the equilibrium geometry of  $\text{BH}_2(^2A')$ .

**Keywords** :  $\text{BH}_2$ , potential energy functional, molecular structure

**PACC** : 3420, 3520G

<sup>†</sup> E-mail : ysy5954418@163.com