

BH₂ 和 AlH₂ 分子的结构及其解析势能函数*

孙金锋^{1,2)} 王杰敏^{1,2)} 施德恒²⁾ 张计才²⁾

1) 洛阳师范学院物理与电子科学系, 洛阳 471022)

2) 河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2005 年 11 月 11 日收到, 2006 年 2 月 24 日收到修改稿)

运用二次组态相关(QCISD)方法, 分别选用 6-311++G(3df,3pd)和 D95(3df,3pd)基组对 BH₂ 和 AlH₂ 分子的结构进行了优化计算, 得到 BH₂ 分子的稳态结构为 C_{2v} 构型, 电子态为 ²A₁, 平衡核间距 R_{BH} = 0.1187nm, 键角 ∠HBH = 128.791°, 离解能 D_e = 3.65eV, 基态振动频率 ν₁(a₁) = 1020.103cm⁻¹, ν₂(a₁) = 2598.144cm⁻¹, ν₃(b₂) = 2759.304cm⁻¹. AlH₂ 分子的稳态结构也为 C_{2v} 构型, 电子态为 ²A₁, 平衡核间距 R_{AlH} = 0.1592nm, 键角 ∠HAlH = 118.095°, 离解能 D_e = 2.27eV, 基态振动频率 ν₁(a₁) = 780.81cm⁻¹, ν₂(a₁) = 1880.81cm⁻¹, ν₃(b₂) = 1910.46cm⁻¹. 采用多体项展式理论推导了基态 BH₂ 和 AlH₂ 分子的解析势能函数, 其等值势能图准确再现了 BH₂ 和 AlH₂ 分子的结构特征及其势阱深度与位置. 分析讨论势能面的静态特征时得到 BH + H → BH₂ 反应中存在鞍点, 活化能为 150.204kJ/mol; AlH + H → AlH₂ 反应中也存在鞍点, 活化能为 54.8064kJ/mol.

关键词: BH₂, AlH₂, Murrell-Sorbie 函数, 多体项展式理论, 解析势能函数

PACC: 3120A, 3130, 3520D, 3520G

1. 引言

作为金属中心催化系统的模型, 金属原子及其离子与共价键分子(如 H₂ 分子)间的反应是非常重要的^[1], 因此人们对金属氢化物的研究产生了很大的兴趣^[2-8]. AlH₂ 作为典型的杂化分子已取得很多研究成果. 元素 B 是元素周期表中化学性质最令人感兴趣的元素之一, 其氢化物 BH₂ 也是我们很感兴趣的研究对象. Pople 等^[9]在 HF/6-31G(d)水平上优化了 BH₂ 和 AlH₂ 的分子结构; Parnis 等^[1,4]采用 IR 和 ESR 光谱研究了 AlH₂ 的光谱特性; Curtiss 等^[10]运用 MP4 方法研究了 BH₂ 分子的能量; Pople 等^[11]后又采用不同的方法和基组计算了 BH₂ 和 AlH₂ 的电子亲和力. Parrtridge 等^[12]采用耦合团簇近似法, 运用大基组计算了 AlH₂ 分子的离解能. 冉鸣等^[13]给出了 AlH₂ 的势能函数, 其中离解能采用 D_e = E(Al) - 2E(H) - E(AlH₂). 以上的研究中都没有涉及到 BH₂ 分子的势能函数.

本文在高斯 03 程序下, 采用二次组态相关

(QCISD)方法, 对 BH₂ 和 AlH₂ 分子的结构进行了优化计算. 在优化的基础上计算了它们的平衡几何、离解能、谐振频率以及力常数等, 推导出了 BH₂(C_{2v}, X²A₁) 和 AlH₂(C_{2v}, X²A₁) 分子的多体项展式势能函数, 并根据势能函数讨论了它们的势能面静态特征.

2. 理论计算

2.1. H₂, BH 和 AlH 分子的势能函数及光谱常数

采用多种方法和基组对 H₂, BH 和 AlH 分子的几何结构进行了优化计算. 结合实验数据, 作者选择 QCISD/6-311++G(3df,3pd)对 H₂ 和 BH 分子、QCISD/D95(3df,3pd)对 AlH 分子进行单点能扫描, 对应于不同核间距的势能值拟合为如下形式的 Murrell-Sorbie(M-S)势能函数^[14]

$$V = -D_e(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (1)$$

式中 ρ = R - R_e, R 为核间距, R_e 为平衡核间距. D_e, a₁, a₂, a₃ 为拟合参数. H₂, BH 和 AlH 分子的势能函数参数列入表 1 中. 势能曲线如图 1 和图 2 所示.

* 国家自然科学基金(批准号:10574039)资助的课题.

表 1 H_2 , BH 和 AlH 分子的基态 M-S 势能函数

电子态	D_e/eV	ω_e/cm^{-1}	a_1/nm^{-1}	a_2/nm^{-2}	a_3/nm^{-3}	R_e/nm	
H_2	$X^1\Sigma_g^+$	4.5846	4402.1467	46.9711	804.0777	8200.1886	0.0742
BH	$X^1\Sigma^+$	3.85	2366.7321	29.761	197.377	1316.8599	0.1233
AlH	$X^1\Sigma^+$	3.29	1693.4641	24.2848	136.9896	653.2069	0.16496

由 M-S 势能函数与力常数的关系、以及力常数 f_2 , f_3 , f_4 与光谱数据的关系^[14], 求得的 BH 和 AlH 分子的光谱常数, 列于表 2 中. 通过表中的比较可知, 本文的方法与实验值符合得很好.

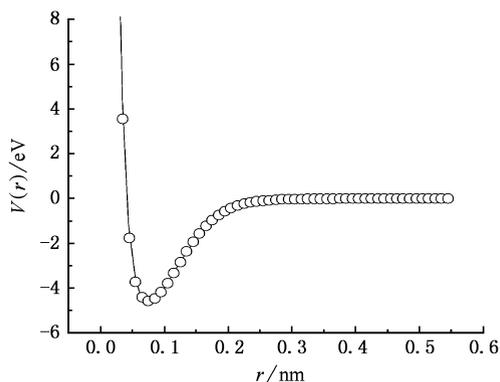
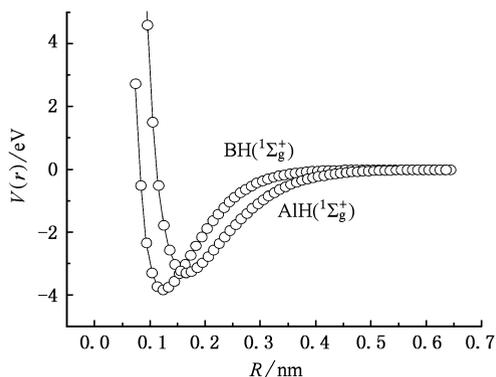
图 1 H_2 分子基态的势能曲线

图 2 BH 和 AlH 分子基态的势能曲线

能曲线, 其中实线为拟合得到的结果, 圆圈线为单点能扫描结果. 由拟合图可见, 拟合得到的离解能和平衡核间距与实验值符合得很好, 而且拟合出的势能曲线与单点能扫描结果也重合得很好. 这说明拟合出的 M-S 势能函数确实正确表达了 H_2 , BH 和 AlH

图 1、图 2 给出了 H_2 , BH 和 AlH 分子的基态势

表 2 BH($X^1\Sigma_g^+$) 和 AlH($X^1\Sigma_g^+$) 分子的光谱常数

	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e X_e/\text{cm}^{-1}$	B_e/cm^{-1}	α_e/cm^{-1}	R_e/nm	D_e/eV
BH	2366.7321	46.7147	11.8896	0.402783	0.12328	3.85
理论 ^[13]	2352.1	46.6	11.91	0.406	0.1238	3.49
实验 ^[15]	2366.7296	49.3398	12.021	0.421566	0.12322	
AlH	1693.4641	26.1484	6.28606	0.1677	0.16496	3.29
实验 ^[16]	1862.6	29.1	6.3907	0.1858	0.16478	

分子的基态势能函数.

2.2. BH_2 和 AlH_2 分子的结构和离解极限

使用多种方法和基组对 BH_2 和 AlH_2 分子的基态几何结构进行优化, 得到 BH_2 分子的最稳态为 C_{2v} 构型, 电子组态为 2A_1 ; AlH_2 分子的最稳态也为 C_{2v} 构型, 电子态为 2A_1 . 结构优化结果见表 3 和表 4.

结合文献 4, 17, 18 给出的实验数据, 分别选择在 QCISD/6-311++G(3df,3pd) 和 QCISD/D95(3df,3pd) 基组水平上对其进行进一步的频率计算, 所得

结果见表 5 和表 6.

三原子体系的势能函数是研究分子碰撞反应动力学的基础, 它是三维空间的一个超曲面. 基态 BH_2 分子属于 C_{2v} 构型, 根据分子反应静力学的微观可逆性原理和能量最低原则^[14, 19], 作者等推导出了 $\text{BH}_2(C_{2v}, X^2A_1)$ 分子的合理离解极限



表 3 BH₂ 分子的基态结构优化结果

	基 组				
	6-311++G(3df,3pd)	6-311G(3df,3pd)	6-311G(d,p)	D95(3df,3pd)	D95V(d,p)
QCISD 方法					
$r_{\text{HB}}, r_{\text{BH}}/\text{nm}$	0.11874	0.11876	0.19191	0.11877	0.11903
$\angle\text{BHB}(\text{°})$	128.791	128.566	128.468	128.559	129.4085
D_e/eV	3.646	3.64904	3.539	3.70024	3.59827
B3LYP 方法					
$r_{\text{HB}}, r_{\text{BH}}/\text{nm}$	0.11854	0.118588	0.18825	0.11862	0.11929
$\angle\text{BHB}(\text{°})$	129.670	129.308	129.248	129.668	130.882
D_e/eV	3.9612	3.96511	3.9555	4.0447	4.0577
B3P86 方法					
$r_{\text{HB}}, r_{\text{BH}}/\text{nm}$	0.11876	0.11879	0.11902	0.11862	0.11885
$\angle\text{BHB}(\text{°})$	129.417	129.163	129.073	129.667	129.494
D_e/eV	4.1111	4.11677	4.1020	4.04465	4.18692

表 4 AlH₂ 分子的基态结构优化结果

	基 组				
	6-311++G(3df,3pd)	6-311G(3df,3pd)	6-311G(d,p)	D95(3df,3pd)	D95V(d,p)
HF 方法					
$r_{\text{HAl}}, r_{\text{AlH}}/\text{nm}$	0.15880	0.15881	0.15084	0.15865	0.15905
$\angle\text{AlHAl}(\text{°})$	118.385	118.361	118.572	118.225	118.208
D_e/eV	2.0654	2.0875	2.0256	2.1373	2.0456
QCISD 方法					
$r_{\text{HAl}}, r_{\text{AlH}}/\text{nm}$	0.15937	0.15938	0.15920	0.15918	0.15896
$\angle\text{AlHAl}(\text{°})$	118.462	118.422	118.782	118.095	118.474
D_e/eV	2.208	2.2085	2.0979	2.2735	2.0678
B3P86 方法					
$r_{\text{HAl}}, r_{\text{AlH}}/\text{nm}$	0.15970	0.15973	0.16013	0.15947	0.16010
$\angle\text{AlHAl}(\text{°})$	117.950	117.916	118.093	117.716	117.827
D_e/eV	2.549	2.527	2.422	2.521	2.461

表 5 BH₂(C_{2v}, X²A₁) 分子的平衡几何及其性质

平衡结构	$r_{\text{BH}} = r_{\text{HB}} = 0.11874\text{nm}$, $\angle\text{HBH} = 128.7914^\circ$
谐振频率	$\nu_1(b_2) = 2759.3041\text{cm}^{-1}$, $\nu_2(a_1) = 1020.1026\text{cm}^{-1}$, $\nu_3(a_1) = 2598.1443\text{cm}^{-1}$
离解能	$D_e = 3.6463\text{eV}$
力常数 ^{a)}	$f_{11} = f_{22} = 0.23861$, $f_{12} = 0.01475$ $f_{aa}(\angle\text{HBH}) = 0.01390$, $f_{1a} = f_{2a} = -0.09084$

a) 力常数的单位为原子单位.

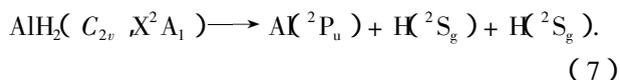
X²A₁) 分子的合理离解极限.表 6 AlH₂(C_{2v}, X²A₁) 分子的平衡几何及其性质

平衡结构	$r_{\text{AlH}} = r_{\text{HAl}} = 0.15918\text{nm}$, $\angle\text{HAlH} = 118.0949^\circ$
谐振频率	$\nu_1(b_2) = 1910.4608\text{cm}^{-1}$, $\nu_2(a_1) = 786.8070\text{cm}^{-1}$, $\nu_3(a_1) = 1880.2490\text{cm}^{-1}$
离解能	$D_e = 2.2735\text{eV}$
力常数 ^{a)}	$f_{11} = f_{22} = 0.25187$, $f_{12} = -0.12003$ $f_{aa}(\angle\text{HAlH}) = 0.10058$, $f_{1a} = f_{2a} = 0.00325$

a) 力常数的单位为原子单位.

基态 AlH₂ 分子也属于 C_{2v} 构型, 同样根据分子反应静力学原理^[14, 19], 作者也推导了 AlH₂(C_{2v},





2.3. BH_2 和 AlH_2 分子的多体项展式势能函数

对于 MH_2 ($M = \text{B}, \text{Al}$) 体系, 设基态原子的能量为零, 则满足离解极限的多体项展式势能函数可写成

$$V(R_1, R_2, R_3) = V_{\text{MH}}^{(2)}(R_1) + V_{\text{HM}}^{(2)}(R_2) + V_{\text{HH}}^{(2)}(R_3) + V_{\text{MH}_2}^{(3)}(R_1, R_2, R_3), \quad (8)$$

其中 $R_1 = R_2 = R_{\text{MH}}, R_2 = R_{\text{HH}}, V_{\text{MH}}^{(2)}(R_1), V_{\text{HM}}^{(2)}(R_2), V_{\text{HH}}^{(2)}(R_3)$ 均为两体项 $\text{MH}(X^1\Sigma_g^+)$ 和 $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+)$ 的势能函数, 采用 Murrell-Sorbie 势能函数来表达. 双原子分子的势能函数参数列于表 1 中. 根据势能面的结构特征, 采用优化内坐标. 取 $\text{MH}_2(X^2A_1)$ 的两个平衡键长作为参考结构, 其中 $R_1^0 = R_2^0 = R_{\text{MH}}, R_3^0 = R_{\text{HH}}$, 内坐标 $\rho_i = R_i - R_i^0$ 可按式变换^[20]:

$$\begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix}. \quad (9)$$

显然, 在平衡构型, 有 $S_1 = S_2 = S_3 = 0$. (8) 式中, $V_{\text{MH}_2}^{(3)}(R_1, R_2, R_3)$ 为三体项, 其形式为

$$V_{\text{MH}_2}^{(3)}(R_1, R_2, R_3) = P \cdot T, \quad (10)$$

式中 P 为多项式, T 为量程函数, 分别表示为

表 7 $\text{BH}_2(C_{2v}, X^2A_1)$ 分子的解析势能函数中的三体项参数

C_0	4.30120039	C_1	35.1539373	C_2	-104.639339	C_3	16.8717194	C_4	956.842422	C_5	-1527.72131	C_6	1184.81188
γ_1	1.0	γ_3	1.2										

表 8 $\text{AlH}_2(C_{2v}, X^2A_1)$ 分子的解析势能函数中的三体项参数

C_0	4.315520	C_1	28.980920	C_2	1154.35257	C_3	20.082051	C_4	483.963127	C_5	-593.575191	C_6	543.659544
γ_1	0.9	γ_3	1.0										

在 X 轴上, 并以 B—H 键的中点为原点建立 Y 轴, 让另一 H 原子绕 B—H 键旋转时所形成的等值势能面. 从图 4 可容易地算出, 当 H 原子旋转到 $\angle\text{HBH} = 128.8^\circ$ 时, BH_2 分子的能量最低, 离解能约 3.65eV, 这和 BH_2 分子从头算的结果是相符的. 基态 BH_2 分子的这两种等值势能图, 是从不同角度检验势能面是否符合三原子分子几何构型的标度. 结果表明, 得到的 BH_2 分子的势能函数解析式, 准确地再现了它的结构特征.

$$P = C_0 + C_1 S_1 + C_2 S_2^2 + C_3 S_3 + C_4 S_3^2 + C_5 S_1 S_3 + C_6 S_1^2. \quad (11)$$

$$T = [1 - \tan(\gamma_1 S_1/2)][1 - \tan(\gamma_3 S_3/2)]. \quad (12)$$

优化内坐标中的 S_2 对 R_1 和 R_2 的交换是反对称的, 但 R_1 和 R_2 交换后的分子结构是等同的. 为了满足这一物理意义上的要求, S_2 只能含偶次项. 对于 $V_{\text{MH}_2}^{(3)}(R_1, R_2, R_3)$, 可以确定 7 个系数 ($C_0, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6$) 和两个非线性系数 (γ_1, γ_3). 其中 7 个系数 $C_0 \sim C_6$ 可根据 MH_2 分子的结构及性质参数所得. 使用表 5 中的数据, 拟合得到 BH_2 分子的解析势能函数三体项中的参数, 列于表 7 中, 使用表 6 中数据, 拟合得到 AlH_2 分子的分析势能函数三体项中的参数, 列于表 8 中. 势能函数 (8) 式的等值势能图如图 3—6 所示.

图 3 和图 4 是根据 BH_2 分子的解析势能函数绘制的等值势能图, 图中清晰地再现了 BH_2 分子的结构特征. 图 3 是固定 $\angle\text{BHB} = 128.7914^\circ$ 的情况下, B—H 键对称伸缩振动的等值势能图. 显然, 在 $R_{\text{BH}} = R_{\text{HB}} \approx 0.12\text{nm}$ 处出现一势阱 (深约 3.6eV), 表示在该处形成 BH_2 分子, 准确地再现了 BH_2 分子的 C_{2v} 结构的特征. 这与优化计算结果相一致. 并且在 $\text{BH} + \text{H} \rightarrow \text{BH}_2$ 反应中存在两个对称的鞍点, 分别位于 (2.34nm, 1.36nm) 和 (1.36nm, 2.34nm) 处, 活化能为 150.204 kJ/mol.

图 4 是在 $R_{\text{BH}} = 0.11874\text{nm}$, 且将 B—H 键固定

图 5 和图 6 是根据 AlH_2 分子的解析势能函数绘制的等值势能图. 图中清晰地再现了 AlH_2 分子的结构特征. 图 5 是固定 $\angle\text{HAlH} = 118.095^\circ$ 的情况下, Al—H 键的对称伸缩振动等值势能面, 从图中可以找到 $\text{AlH}_2(C_{2v}, X^2A_1)$ 的平衡结构 $R_{\text{AlH}} = 0.1592\text{nm}$ 和它的势阱深度 -2.2eV, 而且在两个等价的通道上 $\text{AlH} + \text{H} \rightarrow \text{AlH}_2$ 存在鞍点, 活化能为 54.8064 kJ/mol. 鞍点位置在图 6 中位于 (3.28nm, 2.8nm) 和 (2.8nm, 3.28nm) 处, 说明这是一个有阈能反应.

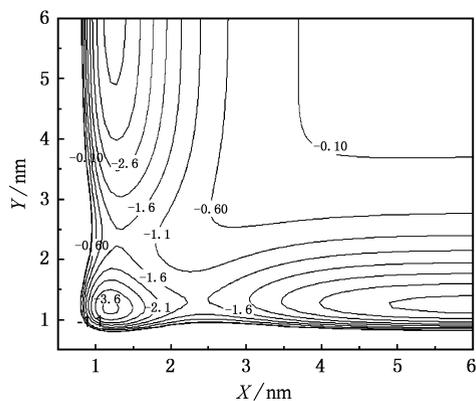
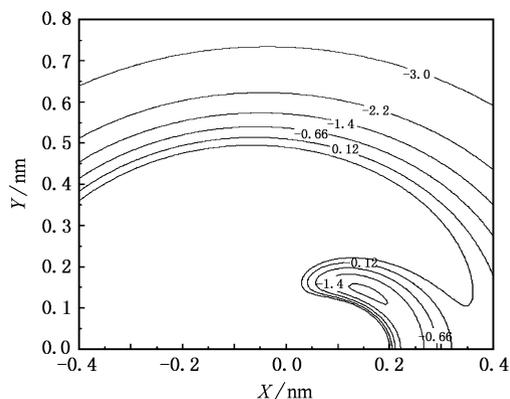
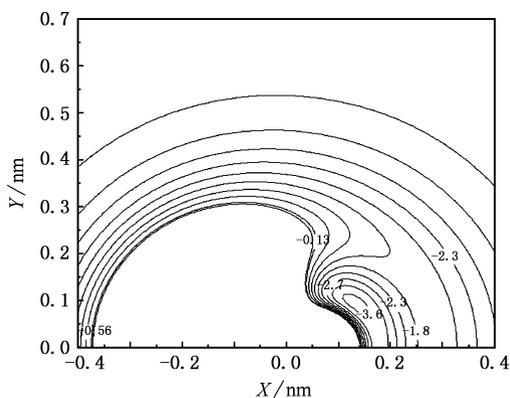
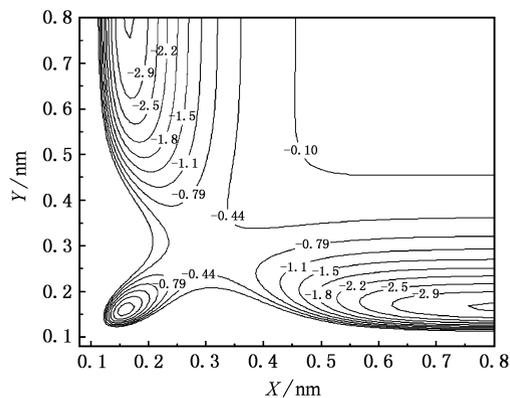
图 3 BH₂ 分子的伸缩振动图图 6 AlH₂ 分子的旋转势能图图 4 BH₂ 分子的旋转势能图图 5 AlH₂ 分子的伸缩振动图

图 6 是将 $R_{\text{AlH}} = 0.1592\text{nm}$ 固定在 X 轴上, 并且以 B—H 键的中点为原点建立 Y 轴, 让另一 H 原子绕 Al—H 键旋转时所形成的等值势能面. 从图 6 可以看出, 在 $R_{\text{AlH}} = 0.1592\text{nm}$, $\angle\text{HAlH} = 118.1^\circ$ 处, 准确再现了势阱深度 (-2.2eV). 这和 AlH₂ 分子从头算的结果是一致的. 显然, 得到的 AlH₂ 分子的解析势能函数准确地再现了它的结构特征.

3. 结 论

运用二次组态相关(QCISD)方法, 对 BH₂ 和 AlH₂ 分子进行了优化计算, 得出其基态结构都为 C_{2v} 构型的结论. 进一步的计算得到了这两个分子的离解能、简正振动频率、力常数等参数. 使用多体项展式理论方法, 导出了这两个分子的基态解析势能函数. 其势能面准确再现了这两个分子的结构特征. 使用其等值势能面讨论了 $\text{BH}({}^1\Sigma_g^+) + \text{H}({}^2S_g)$ 和 $\text{AlH}({}^1\Sigma_g^+) + \text{H}({}^2S_g)$ 反应的势能面静态特征, 得到了它们都为有阈能反应, 活化能分别为 150.204kJ/mol 和 54.8064kJ/mol . 这为进一步研究 $\text{BH}({}^1\Sigma_g^+) + \text{H}({}^2S_g)$ 和 $\text{AlH}({}^1\Sigma_g^+) + \text{H}({}^2S_g)$ 体系的分子反应动力学提供了依据.

- [1] Parnis J M, Ozin G A 1989 *J. Phys. Chem.* **93** 1220
 [2] Goddard W A, Blint R J 1972 *Chem. Phys. Lett.* **14** 616
 [3] Cardelino B H, Eberhardt W H, Borkman R F 1986 *J. Chem. Phys.* **84** 3230
 [4] Parnis J M, Ozin G A 1989 *J. Phys. Chem.* **93** 1215

- [5] Becerra R, Boganov S E, Egorov M P, Nefedov O M, Walsh R 1996 *Chem. Phys. Lett.* **260** 433
 [6] Gridani A E, Mouttadi M E 2000 *Chem. Phys.* **252** 1
 [7] Smith T C, Clouthier J, Sha W, Adam A G 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 9567

- [8] Luo D L , Sun Y , Liu X Y , Jiang G , Meng D Q , Zhu Z H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1896 (in Chinese) [罗德礼、孙颖、刘晓亚、蒋刚、蒙大桥、朱正和 2001 物理学报 **50** 1896]
- [9] Pople J A , Luke B T , Frisch M J , Binkley J S 1985 *J. Phys. Chem.* **89** 2198
- [10] Curtiss L A , Pople J A 1988 *J. Chem. Phys.* **89** 614
- [11] Pople J A , Schleyer P R , Kaneti J , Spitznagel G W 1988 *Chem. Phys. Lett.* **145** 359
- [12] Parrtridge H , Bauschlicher C W , Visscher L 1995 *Chem. Phys. Lett.* **246** 33
- [13] Ran M , Jiang G , Zhu Z H , Jiang G Q , Luo D L , Wu S 1999 *J. At. Mol. Phys.* **16** 553 (in Chinese) [冉鸣、蒋刚、朱正和、蒋国强、罗德礼、武胜 1999 原子与分子物理学报 **16** 553]
- [14] Zhu Z H , Yu H G 1997 *Molecular structure and potential energy function* (Beijing : Science Press) (in Chinese) [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)]
- [15] Meyer W , Rosmus P 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 2356
- [16] Johns J W C , Grimm F A , Porter R F 1967 *J. Mol. Spectrosc.* **22** 435
- [17] Huber K P , Herzberg G 1979 *Molecular spectra and molecular structure* Vol. 4 , Constants of diatomic molecules (New York : Van Nostrand Reinhold) p24
- [18] Herzberg G 1967 *Molecular spectra and molecular structure* Vol. 3 , Electronic spectra and structure of polyatomic molecules (New York : Van Nostrand Princeton) p583
- [19] Zhu Z H 1996 *Atomic and molecular reaction statics* (Beijing : Science Press) (in Chinese) [朱正和 1996 原子分子反应静力学 (北京 : 科学出版社)]
- [20] Ni Y , Jiang G , Zhu Z H , Sun Y , Gao T , Wang H Y 2004 *Acta Phy. -Chim. Sin.* **20** 1380 (in Chinese) [倪羽、蒋刚、朱正和、孙颖、高涛、王红艳 2004 物理化学学报 **20** 1380]

Structure and analytic potential energy functions of the molecules BH_2 and AlH_2 *

Sun Jin-Feng¹⁾²⁾ Wang Jie-Min¹⁾²⁾ Shi De-Heng²⁾ Zhang Ji-Cai²⁾

1) *Department of Physics & Electron Science , Luoyang Normal University , Luoyang 471022 , China*

2) *College of Physics & Information Engineering , Henan Normal University , Xinxiang 453007 , China*

(Received 11 November 2005 ; revised manuscript received 24 February 2006)

Abstract

Quadratic configuration interaction (QCISD) method has been used to optimize the possible ground-state structures of BH_2 and AlH_2 molecules. The results show that the ground state of BH_2 molecule has C_{2v} symmetry and is in the 2A_1 state. The parameters of structure and the harmonic frequencies are $R_{\text{BH}} = 0.1187\text{nm}$, $\angle\text{HBH} = 128.7914^\circ$, $D_e = 3.65\text{eV}$, $\nu_1(a_1) = 1020.103\text{cm}^{-1}$, $\nu_2(a_1) = 2598.144\text{cm}^{-1}$ and $\nu_3(b_2) = 2759.304\text{cm}^{-1}$, respectively. The results also show that the ground state of AlH_2 molecule has C_{2v} symmetry and is in the 2A_1 state. The parameters of structure and the harmonic frequencies are of $R_{\text{AlH}} = 0.1592\text{nm}$, $\angle\text{HAlH} = 118.095^\circ$, $D_e = 2.27\text{eV}$, $\nu_1(a_1) = 780.81\text{cm}^{-1}$, $\nu_2(a_1) = 1880.81\text{cm}^{-1}$ and $\nu_3(b_2) = 1910.46\text{cm}^{-1}$, respectively. The potential energy functions of BH_2 and AlH_2 have been derived from the many-body expansion theory. The potential energy functions describe correctly the configurations and the dissociation energies of the two ground-state molecules. Molecular reaction kinetics of $\text{BH} + \text{H}$ and $\text{AlH} + \text{H}$ based on the potential energy functions is discussed briefly.

Keywords : BH_2 , AlH_2 , Murrell-Sorbie function , many-body expansion theory , potential energy function

PACC : 3120A , 3130 , 3520D , 3520G