

## Be<sup>2+</sup>在水、甲醇和乙醇中结构性质的从头算分子动力学模拟

曾勇平\* 时 荣 杨正华

(扬州大学化学化工学院, 江苏 扬州 225002)

## *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulations of Structural Properties of Be<sup>2+</sup> in Water, Methanol and Ethanol

ZENG Yong-Ping\* SHI Rong YANG Zheng-Hua

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225002, Jiangsu Province, P. R. China)

表 S1 模拟体系的分子数和尺寸

Table S1 number of molecules and size of cell

System	Number of solvent molecules	Side of cell(nm)
Be <sup>2+</sup> in water	32	0.989
Be <sup>2+</sup> in methanol	25	1.194
Be <sup>2+</sup> in ethanol	25	1.35

## 二聚体结构

为了验证计算方法的合理性, 本文计算了 Be<sup>2+</sup> 分别与水、甲醇和乙醇二聚体的结构参数和结合能等方面的数据. 其二聚体的几何结构见图 S1, 二聚体分子间 O...Be<sup>2+</sup> 的距离、Be<sup>2+</sup>...OH 角度及结合能汇于表 S2.

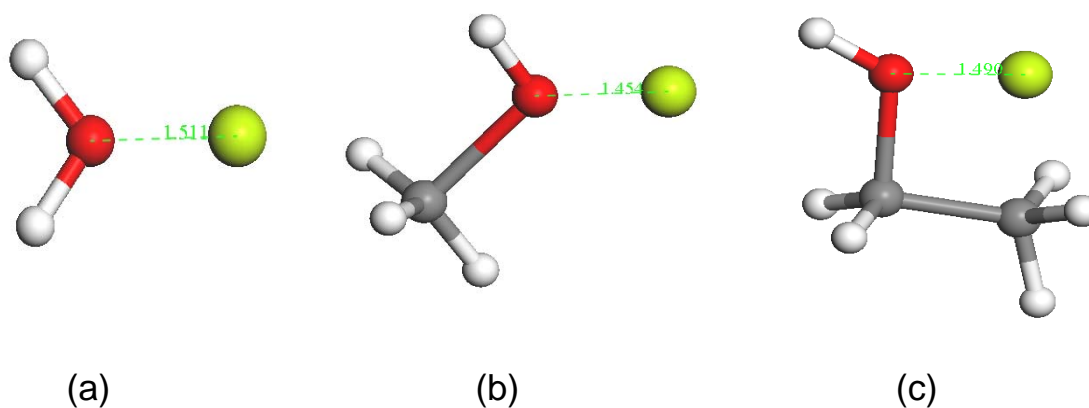


图 S1 络合物的几何构型

Fig.S1 Geometry structure of complexes

(a): H<sub>2</sub>O...Be<sup>2+</sup>; (b): CH<sub>3</sub>OH...Be<sup>2+</sup>; (c): C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH...Be<sup>2+</sup>

表 S2 络合物的结合能及特定的几何性质

Table S2 Binding energy and salient Structural data of the complexes\*

	H <sub>2</sub> O...Be <sup>2+</sup>	CH <sub>3</sub> OH...Be <sup>2+</sup>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH...Be <sup>2+</sup>
$r(\text{O}\dots\text{Be}^{2+})/\text{nm}$	0.1511(0.1550 <sup>1</sup> ;0.1510 <sup>2</sup> )	0.1454(0.1489) <sup>3</sup>	0.1490
$\alpha(\text{BeOH})/(\text{^\circ})$	126.359/126.305(126.34) <sup>4</sup>	122.528	148.788
$\alpha(\text{BeOC})/(\text{^\circ})$		132.392(132.4) <sup>3</sup>	90.808
$E/(\text{kJmol}^{-1})$	-604.37(-610.198 <sup>1</sup> ;-577.676 <sup>2</sup> )	-735.25	-874.98

\*括号中为文献报道值

---

从图可以看出,同样是氧原子的孤对电子与  $\text{Be}^{2+}$  的作用最为明显.  $\text{CH}_3\text{OH}\dots\text{Be}^{2+}$  络合物中  $\text{O}\dots\text{Be}^{2+}$  的距离最短,为 0.1454 nm,其次是  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}\dots\text{Be}^{2+}$  络合物 0.1490 nm,  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{Be}^{2+}$  络合物 0.1511 nm. 除乙醇尚无实验报道外,从表中可以看出平面波基组的 BLYP 函数很好地重复了二聚体和络合物的结构参数,在甲醇略低估外,角度较好地一致. 结果表明本文选用的赝势和截断能量是合理的.

(1)Pavlov M.; Siegbahn P. E..M.; Sandstrom M. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 219.

(2)Yang Z.; Li X.; *J. Chem. Phys.* **2005**, *123*, 094507.

(3)Huang Z.; Chen M.; Zhou M. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 3390.

(4)Martinez R.; Brito F.; Lorena M.; Araujo L.; Fuette F.; Sierraalta A. *Inter. J. Quant. Chem.* **2004**, *97*, 854.