

分子间相互作用能量的正交分解

丁涪江,张良辅,李广年

中国科学院成都有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 对反应 $A+B=AB$, 将反应物 $A+B$ 的波函数生成物 AB 的组态波函数正交展开, 可以得到 AB 键形成时 σ 键和 π 键所占的比例,

从而提供了一种研究分子间相互作用本质的半定量方法。以 $BH_3+CO=H_3BCO$ 反应为例说明了该方法的应用。

关键词 [化学反应](#) [分子轨道理论](#) [能量分解法](#)

分类号 [0641](#)

Orthogonality decomposition scheme of molecular interaction energy

DING FUJIANG,ZHANG LIANGFU,LI GUANGNIAN

Abstract The mol. interaction energy orthogonality decomposition method is based on expanding the wave function of combined reactants A and B into a series of selected electronic configuration wave functions of the product AB. A quant. estimate of the relative importance of s and p bond in A-B bond is obtained. As an example, the orthogonality decomposition of the reaction energy of BH_3 and CO forming borane carbonyl is carried out to illustrate the application of this method.

Key words [CHEMICAL REACTION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ENERGY DECOMPOSITION METHOD](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“化学反应”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [丁涪江](#)

· [张良辅](#)

· [李广年](#)