

## 量子化学及计算化学

### 取代基对N—H...O=C氢键三聚体中氢键强度的影响

张敏, 郑艳萍, 姜笑楠, 王长生

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029

#### 摘要:

使用MP2方法研究了氢键三聚体中N—H...O=C氢键强度, 探讨了氢键受体分子中不同取代基对N—H...O=C氢键强度的影响. 研究表明, 不同取代基对氢键三聚体中N—H...O=C氢键强度的影响是不同的: 取代基为供电子基团, 氢键键长 $r(\text{H}\cdots\text{O})$ 缩短, 氢键强度增强; 取代基为吸电子基团, 氢键键长 $r(\text{H}\cdots\text{O})$ 伸长, 氢键强度减弱. 自然键轨道(NBO)分析表明, N—H...O=C氢键强度越强, 氢键中氢原子的正电荷越多, 氧原子的负电荷越多, 质子供体和受体分子间的电荷转移越多. 供电子基团使N—H...O=C氢键中氧原子的孤对电子 $n(\text{O})$ 对N—H的反键轨道 $\sigma^*(\text{N—H})$ 的二阶相互作用稳定化能增加, 吸电子基团使这种二阶相互作用稳定化能减小. 取代基对与其相近的N—H...O=C氢键影响更大.

关键词: 氢键三聚体 取代基 氢键强度 自然键轨道分析

收稿日期 2009-08-15 修回日期 2009-11-03 网络版发布日期 2010-01-05

通讯作者: 王长生 Email: chwangcs@lnnu.edu.cn

#### 本刊中的类似文章

1. 周原;梅虎;梁桂兆;李志良.取代基物化参数及其在药物定量构效关系中的应用[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 486-491
2. 曾锡瑞;张勇;游效曾.过氧草酸酯结构和取代基对其化学发光的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 361-363
3. 周传华;李奇;黄元河;刘若庄.聚噻吩取代效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 825-829
4. 李庆明;方德彩;傅孝愿.烷基氟化物热消除反应的理论研究-1[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 434-437
5. 李庆明;方德彩;傅孝愿.烷基氟化物消除氟化氢反应的取代基效应-2[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 12-14
6. 张煊;郭琳;江云宝.水杨酰苯胺衍生物分子内电荷/质子转移荧光[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 930-935
7. 梁晓琴;蒲雪梅;田安民.均三嗪含氮取代基衍生物的结构和性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 639-645
8. 林英武;王中华;聂长明;倪峰云.取代基对吡吩结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
9. 李文革;张建恒;刘志杰.8-取代苯乙烯基-10, 10-二甲基-10H-吡啶并[1, 2-a]咪唑盐的紫外和荧光光谱[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 725-729

扩展功能

本文信息

PDF(789KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 氢键三聚体

▶ 取代基

▶ 氢键强度

▶ 自然键轨道分析

本文作者相关文章

▶ 张敏

▶ 郑艳萍

▶ 姜笑楠

▶ 王长生