

叠氮根电负性的量子化学研究

李永富,肖鹤鸣

华东工学院化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用ab initio, MINDO/3, MNDO和DV-Xa等量子化学方法计算研究了一些分子型和离子型(碱金属)叠氮化物及相应氯化物的平衡构型和电子结构。结构表明: 在分子型叠氮化物中叠氮根的电负性较氯小、与氮相当; 而在离子型金属叠氮化物中, 叠氮根的电负性和氯相当或较氯稍大。将计算所得正则离域分子轨道进行定域化处理, 发现产生这种电负性差异的主要原因是上述两类叠氮化物中N₂的成键状况不同, 本文对此进行了较为细致的分析。

关键词 [叠氮化物](#) [氯化物](#) [电子结构](#) [从头计算法](#) [电负性](#) [分子轨道计算](#)

分类号 [0641](#)

A quantum-chemical study on electronegativity of N₃

LI YOAGFU, XIAO HEMING

Abstract Ab initio MINDO/3, MNDO and DV-Xa quantum chem. calcns. were used to study several mol. and ionic azides and their corresponding chlorides. The electronegativities of mol. azides were smaller than those of the chlorides, but larger than those of the ionic azides. The localized and delocalized MO were calculated. The differences in electronegativities in the ionic and nonionic azides were attributed to the difference and bonding types.

Key words [AZIDE](#) [CHLORIDE](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [ELECTRONEGATIVITY](#) [MOLECULAR ORBITALS CALCULATIONS](#)

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“叠氮化物”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [李永富](#)
- [肖鹤鸣](#)