

## 研究论文

### 氢氰酸、异氰酸与水氢键的量子化学研究

王曙光; 潘道皓; 袁身刚

华东师范大学化学系; 上海有机化学研究所

摘要:

用LCAO-MO-SCF的ab initio方法, 在4-31G水平上, 对CNH...OH<sub>2</sub>, NCH...OH<sub>2</sub>, HNC...HOH, HCN...HOH四种氢键体系进行了能量梯度法的构型优化和计算, 并分别进行了Morokuma能量分解分析, 计算了各作用能对氢键形成的贡献。考察了各作用能随氢键键长的变化情况。从理论上解释了各氢键体系键能强弱次序的变化。在一般情况下, 静电作用的大小可以决定氢键键能的强弱次序; 但在某些情况下, 电荷迁移作用也很重要, 需从这两方面综合考虑才能确定键能的强弱次序。

关键词:

收稿日期 1988-08-08 修回日期 1988-10-24 网络版发布日期 1989-08-15

通讯作者: 王曙光 Email:

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(2535KB\)](#)

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](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [王曙光](#)

▶ [潘道皓](#)

▶ [袁身刚](#)