

环芳有机分子中分子轨道的通过空间相互作用

刘韩星

武汉工业大学新材料研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文给出了描述环芳类化合物分子轨道通过空间相互作用的模型,进一步采用离散变分 $X\sim\alpha$ 自洽场方法研究它们的电子结构,并计算三类环芳有机分子轨道的通过空间相互作用,计算结果表明环芳类有机分子的通过空间相互作用的大小随分子中苯环、乙炔、乙烯间距离的增大而衰减,本文的结果与定性分析是一致的。

**关键词** [电子结构](#) [分子轨道理论](#) [芳香族化合物](#) [自洽场](#) [空间化学](#) [环状化合物](#) [离散变量法](#)

分类号 [0641](#)

## Theoretical study on the through-space interactions in cyclophanes

LIU HANXING

**Abstract** Model systems for the description of the through-space interactions in cyclophanes are introduced in the present study. Furthermore the electronic structure of the model systems are studied by means of the DV- $X\sim\alpha$  method. The one-electron energy levels of the model systems are used to calculate the magnitude of the through-space interactions in cyclophanes. The results show the through-space interactions decrease with the increasing of the distance of the interdeck.

**Key words** [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [AROMATIC COMPOUNDS](#) [SELF-CONSISTENT FIELD](#) [SPACE CHEMISTRY](#) [CYCLIC COMPOUNDS](#) [DISCRETE VARIABLE METHOD](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(335KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“电子结构”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘韩星](#)