

小螺旋烷的"弯键"研究

赵存元, 韦统师, 邱文元

西北师范学院化学系; 兰州大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文利用Hellmann-Feynman力的ab initio计算程序ABHF, 定义了小螺旋烷中弯键的张力、应变能、键弯曲角等公式, 计算了[1.1.1]螺旋烷、[2.1.1]螺旋烷、[2.2.2]螺旋烷[2.2.2]螺旋烷的重叠力 f_0 、等效点电荷 q^0 、键的弯曲角 α 、张力 f 、键合力 F 、应变能 ϵ 等。对这种具有较高键张力的分子进行了稳定性和成键特性等方面的研究, 计算及理论分析结果满意地解释了实验事实。

关键词 [化学键](#) [从头计算法](#) [分子轨道理论](#) [成键](#) [螺环化合物](#) [张力](#) [螺旋烷](#)

分类号 [0641](#)

Study on bent bonds in small propellanes

ZHAO CHUNYANG, WEI TONGSHI, QIU WENYUAN

Abstract The formula for the calculation of the strain, the strain energy, and the angles of the bent bonds in small propellanes are proposed by using the ab initio program ABHF for calculating Hellmann-Feynman forces. The overlapping forces f_0 and the corresponding equivalent point charges, the angle α of the bent bonds, the strain f_0 , the bonding force F and the strain energy ϵ of the bent bonds of [1.1.1] propellane, [2.1.1] propellane, [2.2.1] propellane and [2.2.2] propellane were calculated. The stabilities and the bonding behavior of these high strained mols. were also investigated. The theor. predictions are all in good agreement with the experimental results.

Key words [CHEMICAL BONDS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [BONDING](#) [SPIRO COMPOUNDS](#) [TENSION](#)

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“化学键”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [赵存元](#)

· [韦统师](#)

· [邱文元](#)