

FULL PAPERS

氟化物与吡咯复合物氢键强度的理论研究

史福强*, 安静仪, 俞稼骥

中国科学院理化技术研究所 北京 100101

收稿日期 2004-2-27 修回日期 2004-12-28 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文对R—C≡N…pyrrole (R=H, CH₃, CH₂F, CHF₂, CF₃, NH₂, BH₂, OH, F, CH₂Cl, CHCl₂, CCl₃, Li, Na) 系列氢键复合物在B3LYP/6-311++G**水平下进行了量子化学研究, 对表征氢键作用强度的几何参数(R_{H-N})、拓扑参数(ρ_{H-N} , ρ_{H-N} , $\nabla^2\rho_{H-N}$), N—H键频率变化($\Delta\nu_{N-H}$)以及由自然键轨道分析得到的电荷转移CT与分子间相互作用能进行的线性关联, 发现几何参数 R_{H-N} 以及以AIM理论和自然键轨道分析得到的电性参数与氢键强度具有较好线性关系。这与其它同类体系中的文献报道一致。但是在本工作中还发现以AIM理论分析得到的N—H键的临界点电荷密度同样与分子间相互作用能具有良好的线性关系, 说明以AIM理论分析得到的临界点电子密度表征氢键强度适用范围更广泛, 并且可能应用到非同类型氢键复合物氢键强度的比较。

关键词 [氢键](#), [键临界点](#), [自然键轨道](#)

分类号

Theoretical Study on Measure of Hydrogen Bonding Strength: R—C≡N…pyrrole Complexes

SHI Fu-Qiang*, AN Jing-Yi, YU Jia-Yong

The Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China

Abstract

The R—C≡N…pyrrole (R=H, CH₃, CH₂F, CHF₂, CF₃, NH₂, BH₂, OH, F, CH₂Cl, CHCl₂, CCl₃, Li, Na) complexes were considered as the simple sample for measure of hydrogen bonding strength. Density functional theory B3LYP/6-311++G** level was applied to the optimization of geometries of complexes and monomers. Measure of hydrogen bonding strength based on geometrical and topological parameters, which were derived from the AIM theory, was analyzed. Additionally, natural bond orbital (NBO) analysis and frequency calculations were performed. From the computation results it was found that the electronic density at N—H bond critical points was also strictly correlated with the hydrogen bonding strength.

Key words [hydrogen bonding](#), [bond critical points](#), [natural bond orbital](#)

DOI:

通讯作者 史福强 shfq1976@sohu.com

扩展功能

本文信息

[Supporting info](#)[PDF\(OKB\)](#)[HTML全文\(OKB\)](#)[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“氢键、键临界点、自然键轨道”的相关文章](#)[本文作者相关文章](#)· [史福强](#)· [安静仪](#)· [俞稼骥](#)