

引用信息: Yu Qing-Sen; Cai Guo-Qiang; Dong Nan; Wu Nian-Ci. Acta Phys. -Chim. Sin., 1990, 6(04): 399-402 [俞庆森;蔡国强;董南;吴念慈. 物理化学学报, 1990, 6(04): 399-402]

[本期目录](#) | [在线预览](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## 研究论文

### CX<sub>3</sub>NO(X=F、Cl)分子结构和稳定性的*ab initio*研究

俞庆森; 蔡国强; 董南; 吴念慈

浙江大学化学系; 杭州大学化学系

#### 摘要:

本文用STO-3G基组对分子CF<sub>3</sub>NO(1)、CF<sub>2</sub>ClNO(2)、CFCl<sub>2</sub>NO(3)和CCl<sub>3</sub>NO(4)的各种可能存在的稳定构型进行了研究. 结果表明:(1) 卤素与氧在同侧的构型比其它构型稳定;(2) 在同一分子中, Cl与O同侧比F与O同侧更为稳定;(3) 分子从1至4稳定性下降. 本文计算结果与实验符合较好.

#### 关键词:

收稿日期 1989-01-12 修回日期 1989-07-14 网络版发布日期 1990-08-15

通讯作者: 蔡国强 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(3178KB\)](#)

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](#)

▶ [俞庆森](#)

▶ [蔡国强](#)

▶ [董南](#)

▶ [吴念慈](#)