

## 脱氢苯甲醛肟二聚体电子结构的EHMO计算

孙岳明,魏旭东,胡宏纹,江元生

东南大学化学化工系;南京大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用EHMO方法对脱氢苯甲醛肟二聚体进行了电子结构的计算,得N-N键长为0.163nm,并对其分子轨道和成键情况进行了分析。和1,2-二苯亚乙基肼相比,N-N键明显削弱,键级仅为0.4842,很容易形成自由基,从理论上支持了Horner等人提出的观点,较好地解释了某些实验现象。

**关键词** [二聚体](#) [分子轨道](#) [电子结构](#) [成键](#) [EHMO方法](#) [脱氢苯甲醛肟](#)

分类号 [0621.16](#)

## EHMO calculation on electronic structure of dehydrobenzaloxime dimer

SUN YUEMING,WEI XUDONG,HU HONGWEN,JIANG YUANSHENG

**Abstract** The electronic structure of dehydrobenzaloxime dimer was calculated using EHMO method. The optimization calculations of the structure showed that the N-N bond is 0.163nm. The molecular orbital and bonding character were discussed. In comparison with benzaldazine, the bond order is only 0.4842, N-N bond in dehydrobenzaloxime dimer is weakened obviously. The results offered a satisfactory explanation for some experimental phenomena and were helpful to further studies of synthesis.

**Key words** [DIMER](#) [MOLECULAR ORBIT](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [BONDING](#) [EHMO METHOD](#)

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“二聚体”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [孙岳明](#)
- [魏旭东](#)
- [胡宏纹](#)
- [江元生](#)