

# HCN(HNC)与NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O和HF分子间相互作用的理论研究

汪朝旭, 张敬畅, 曹维良

(北京化工大学现代催化研究所, 化工资源有效利用国家重点实验室, 北京 100029)

**摘要** 在MP2/aug-cc-pVTZ水平上, 对HCN(HNC)与NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O和HF分子间可能存在的氢键型复合物进行了全自由度能量梯度优化, 通过在相同水平上的频率验证分析发现了稳定的分子间相互作用形式是HCN(HNC)作为质子供体或作为质子受体形成的复合物. 基组重叠误差对总相互作用能的影响均小于3.34 kJ/mol. 通过自然键轨道(NBO)分析, 研究了单体和复合物中的原子电荷和电荷转移对分子间相互作用的影响. 对称性匹配微扰理论(SAPT, Symmetry Adapted Perturbation Theory)能量分解结果表明, 在分子间相互作用中, 静电作用与诱导作用占主导地位, 而诱导作用与复合物的电荷转移之间具有良好的正相关性.

**关键词** HCN(HNC); 分子间相互作用; 基组重叠误差; 自然键轨道; 对称性匹配微扰理论

**中图分类号** O641      **文献标识码** A      **文章编号** 0251-0790(2007)02-0320-05

分子间相互作用在生物科学和材料科学中起到关键性作用, 对分子间相互作用本质的研究具有十分重要的意义. 氢键作用是分子间相互作用中的一种主要形式, 其在化学和生物学等领域中的重要性已引起越来越多学者的广泛关注<sup>[1,2]</sup>. 长期以来, 随着对氢键研究的发展, 提出了一些新的氢键类型, 如C原子可以作为质子受体而参与形成氢键等<sup>[3~5]</sup>.

氰化物是一种对生态环境具有严重破坏性的剧毒类物质. 氰化氢(HCN)及其异构体异氰化氢(HNC)作为氰化物中的重要一员, 其对环境污染的严重性已引起了人们的高度重视<sup>[6~8]</sup>. HCN(HNC)作为质子给体或质子受体在理论上均可以与空气中的许多物质, 如H<sub>2</sub>O等形成分子间氢键. 研究HCN(HNC)与H<sub>2</sub>O等分子间相互作用及其作用本质对了解HCN(HNC)在大气中的主要存在形式具有重要的理论意义.

本文选取HCN(HNC)与NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O和HF的复合物作为研究体系, 用量子化学从头计算方法及对称性匹配微扰理论研究了上述体系中分子间的相互作用及其作用本质, 得到了一些有意义的结论.

## 1 计算方法

考虑到电子相关效应对分子间弱相互作用几何构型的影响, 本文采用二级Moller-Plesset微扰理论(MP2), 选择充分考虑极化和弥散作用的aug-cc-pVTZ基组, 对单体及复合物可能存在的几何构型进行了全自由度能量梯度优化及频率验证. 其中, 在对相互作用能的计算中, 基函数的重叠误差(BSSE)采用Boys和Bernardi的完全均衡校正法(Counterpoise Procedure)<sup>[9]</sup>加以消除.

采用SAPT方法<sup>[10]</sup>可在电子相关校正级别上, 通过对分子间相互作用能的成分分析来探讨弱相互作用的本质. 它将相互作用能分解为静电能、诱导能、色散能和交换能. 本文在优化得到的稳定构型的基础上, 用SAPT2方法在aug-cc-pVTZ基组水平上对复合物进行了相互作用能的能量分解分析.

所选体系的几何结构优化、相互作用能计算和自然键轨道(NBO)分析均采用Gaussian 03程序, 在Intel Xeon NOCONA并行计算机上完成, 相互作用能的分解采用SAPT 2002程序完成.

收稿日期: 2006-03-23.

基金项目: 国家自然科学基金(批准号: 20040010008, 20050010014)资助.

联系人简介: 曹维良(1942年出生), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事量子化学研究. E-mail: caowl@mail.buct.edu.cn

## 2 结果与讨论

### 2.1 复合物的几何构型及特征

HCN(HNC)和 NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 分子间可能存在的复合物的几何构型经全自由度优化, 得到了势能面上极小的两类稳定构型: (1) 以 HCN(HNC)为质子供体的氢键型复合物; (2) 以 HCN(HNC)为质子受体的氢键型复合物(图 1).

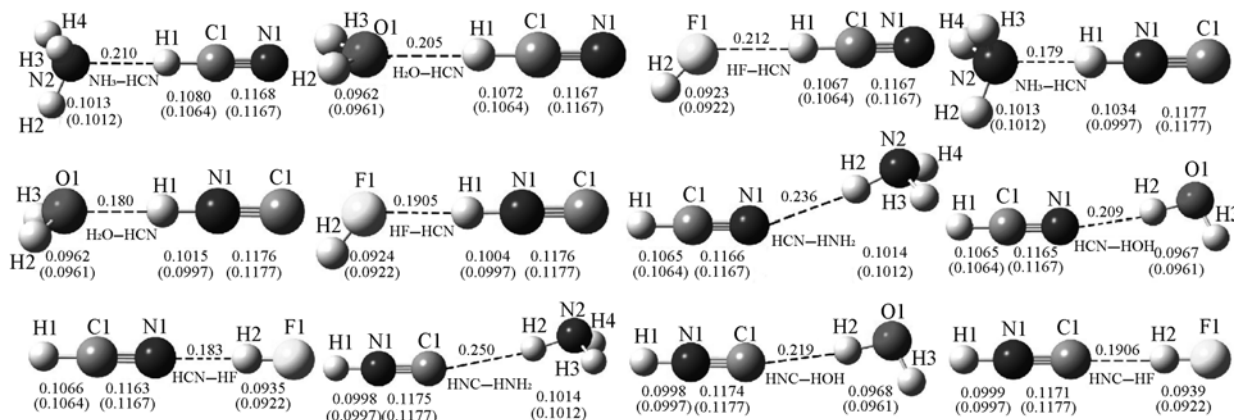


Fig. 1 Optimized geometries of complexes as the proton donor or the proton acceptor

HCN(HNC) (values in parentheses are the data of the monomers; the unit is nm).

由图 1 可见, 与单体相比, 复合物的键长均有一定程度的变化: (1) 当 HCN(HNC)为质子供体时, 其 X—H(X=N, O, F)键长与单体的相应键长相比略有增加, 增幅为 0.0001 ~ 0.0003 nm; 而 HCN(HNC)中的 C—H 和 N—H 键长与单体的相应键长相比则增加较大, 其增幅为 0.001 ~ 0.004 nm. 这些键长的变化都是由于 HCN(HNC)中的 H 原子与 NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 中的重原子 X 之间形成了传统氢键作用引起的. 从图 1 可知, HCN(HNC)的 C—H 和 N—H 的键长变化是随着复合物中氢键键长 R 的增长而减小的. (2) 当 HCN(HNC)为质子受体时, 其 X—H 键的变化更为显著, 其键长增幅为 0.0002 ~ 0.0017 nm. 值得注意的是: HCN(HNC)中的 C—N 和 N—C 键长比单体的键长有不同程度的减小, 其减幅为 -0.0006 ~ -0.0001 nm. 这可能是由于形成复合物后, 电荷从 NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 向 HCN(HNC)反键  $\pi^*$  轨道转移所致.

图 1 中所示的两类分子间相互作用的能量值和部分几何构型参数列于表 1.

Table 1 Selected parameters to the complexes of HCN(HNC) as the proton donor(acceptor)

Species	$\Delta E/(kJ \cdot mol^{-1})$	$\Delta E_{corr}/(kJ \cdot mol^{-1})$	BSSE	$\Delta E^{CP}/(kJ \cdot mol^{-1})$	ZPE	$\Delta E^{CP+ZPE}/(kJ \cdot mol^{-1})$	R/nm
H <sub>3</sub> N—HCN	-28.478	-5.915	2.366	-26.112	6.663	-19.449	0.210
H <sub>2</sub> O—HCN	-22.760	-3.122	2.203	-20.557	4.702	-15.855	0.205
HF—HCN	-13.347	-2.128	1.931	-11.415	3.156	-8.260	0.212
H <sub>3</sub> N—HNC	-49.453	-17.176	3.193	-46.260	8.882	-37.377	0.179
H <sub>2</sub> O—HNC	-36.445	-10.646	2.947	-33.498	7.419	-26.079	0.180
HF—HNC	-20.168	-6.312	2.479	-17.690	4.702	-12.987	0.190
HCN—HNH <sub>2</sub>	-9.856	-5.685	1.455	-8.402	3.674	-4.727	0.236
HCN—HOH	-18.375	-7.240	2.006	-16.369	5.919	-10.450	0.209
HCN—HF	-33.239	-8.143	2.529	-30.710	8.456	-22.254	0.183
HNC—HNH <sub>2</sub>	-9.718	-6.416	1.463	-8.255	3.887	-4.368	0.250
HNC—HOH	-19.199	-9.606	2.002	-17.196	6.216	-10.981	0.219
HNC—HF	-35.973	-13.121	2.508	-33.465	8.770	-24.695	0.191

### 2.2 原子电荷和电荷转移与分子间相互作用的关系

为了探讨原子电荷和电荷转移对分子间相互作用的影响, 对单体和复合物均进行了自然键轨道(NBO)分析. 单体及复合物中各原子的净电荷及电荷转移情况列于表 2.

HCN(HNC)作为质子供体形成复合物后, 与单体相比, H 原子得到了一定的电荷, 而非氢原子均

Table 2 The net atomic charges and charges transfer in the complexes at the MP2/aug-cc-pVTZ level

Species	N	C	H	N	O	F	H	$\Delta Q$
H <sub>3</sub> N	—	—	—	1.030	—	—	0.344	0.00
H <sub>2</sub> O(HF)	—	—	—	—	0.923	-0.559	0.461(0.559)	0.00(0.00)
HCN(HNC)	-0.341(-0.824)	0.117(0.372)	0.223(0.452)	—	—	—	—	0.00(0.00)
H <sub>3</sub> N—HCN	-0.385	0.103	0.260	-1.046	—	—	0.356	0.021
H <sub>2</sub> O—HCN	-0.376	0.112	0.253	—	0.944	—	0.477	0.011
HF—HCN	-0.362	0.116	0.241	—	—	0.567	0.572	0.005
H <sub>3</sub> N—HNC	-0.843	0.315	0.476	-1.038	—	—	0.363	0.051
H <sub>2</sub> O—HNC	-0.832	0.331	0.475	—	-0.941	—	0.483	0.025
HF—HNC	-0.8244	0.347	0.466	—	—	-0.566	0.577	0.011
HCN—HNH <sub>2</sub>	-0.368	0.143	0.226	-1.047	—	—	0.369	0.001
HCN—HOH	-0.392	0.168	0.229	—	-0.948	—	0.491	0.004
HCN—HF	-0.422	0.205	0.234	—	—	-0.604	0.586	0.017
HNC—HNH <sub>2</sub>	-0.808	0.357	0.454	-1.049	—	—	0.367	0.003
HNC—HOH	-0.791	0.346	0.457	—	-0.952	—	0.486	0.012
HNC—HF	-0.762	0.344	0.461	—	—	-0.613	0.570	0.043

失去了电荷; NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 中的重原子 X(X = N, O, F) 均失去了一定的电荷, 而氢原子则得到了一定的电荷(表 2). 形成复合物后, 电荷由 HCN(HNC) 的成键  $\pi$  轨道向 NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 的反键  $\sigma^*$  轨道转移, 净电荷转移数分别为 0.021, 0.011 和 0.005 e(0.051, 0.025 和 0.011 e).

HCN(HNC) 作为质子受体形成复合物后, 与单体相比, H 原子得到了一定的电荷, 直接参与形成氢键的重原子(HCN—HX 中的 N 原子及 HNC—HX 中的 C 原子)失去了电荷, 而非直接参与形成氢键的重原子(HCN—HX 中的 C 原子及 HNC—HX 中的 N 原子)都得到了一定的电荷; NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 中的重原子 X 均失去了一定的电荷, 而氢原子则得到了一定程度的电荷(表 2). 电荷由 NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O 和 HF 的成键  $p$  轨道向 HCN(HNC) 的反键  $\pi^*$  轨道转移, 净电荷转移数分别为 0.001e, 0.004e 和 0.017e(0.003e, 0.012e 和 0.043e).

由表 1 和表 2 发现, 由相同单体形成的两类复合物中, 电荷转移数越大的复合物, 其氢键键长越短, 相互作用能越大, 构型越稳定. 因此, 从电荷转移数的多少可以判断其分子间相互作用的大小, 电荷转移数越大则分子间相互作用越强.

### 2.3 相互作用能

由表 1 中所列出的所有复合物的分子间相互作用能( $\Delta E$ )、电子相关能( $\Delta E_{\text{corr}}$ )以及经 BSSE 和 ZPE 校正后的分子间相互作用能( $\Delta E^{\text{CP}}$  和  $\Delta E^{\text{CP}+\text{ZPE}}$ )可知, 无论 HCN(HNC) 是作为质子供体还是作为质子受体, 电子相关能( $\Delta E_{\text{corr}}$ )对分子间相互作用能( $\Delta E$ )的贡献均不可忽视, 其贡献值约为 14% ~ 66%. 这进一步说明了在研究此类分子间氢键相互作用时必须考虑电子相关效应.

由表 1 可见, 经 BSSE 校正的相互作用能  $\Delta E^{\text{CP}}$  与未校正的相互作用能  $\Delta E$  相差不大. 复合物的 BSSE 值均小于 3.34 kJ/mol. 由于使用了较大的基组 aug-cc-pVTZ, 可以将基组重叠误差(BSSE)降低约 4.18 kJ/mol<sup>[11]</sup>. ZPE 校正值较大, 约为 BSSE 校正值的 2 倍, 这说明对于此类体系进行 ZPE 校正是非常必要的. 按经过 BSSE 和 ZPE 校正后的分子间相互作用能( $\Delta E^{\text{CP}+\text{ZPE}}$ )大小排序, 对于由相同单体形成的不同类型复合物而言, 其分子间相互作用的强弱顺序如下: H<sub>3</sub>N—HCN > HCN—HNH<sub>2</sub>; H<sub>2</sub>O—HCN > HCN—H<sub>2</sub>O; HCN—HF > HF—HCN; H<sub>3</sub>N—HNC > HNC—HNH<sub>2</sub>; H<sub>2</sub>O—HNC > HNC—HOH; HNC—HF > HF—HNC. 这与氢键键长排序结果和电荷转移排序结果相吻合. 这可以通过原子的净电荷数据(表 2)从质子受体的质子接受能力和质子供体的质子给予能力两个方面来解释. 质子受体的电荷数越负, 质子供体的电荷数越正, 则分子间的相互作用就越强.

### 2.4 相互作用能的能量分解

超分子方法(SM)只能给出相互作用能的大小而不能得到其物理图像. 为了探讨分子间相互作用的本质, 本文用 SAPT2 方法对复合物的相互作用能进行了能量分解, 其结果列于表 3. 其能量关系式为

$$E_{\text{int}}^{\text{SAPT}} = E_{\text{int}}^{\text{HF}} + E_{\text{int}}^{\text{Corr}}$$

$$E_{\text{int}}^{\text{HF}} = E_{\text{elst}}^{(10)} + E_{\text{exch}}^{(10)} + E_{\text{ind}, r}^{(20)} + E_{\text{exch-ind}, r}^{(20)} + \delta E_{\text{int}, r}^{\text{HF}}$$

$$E_{\text{int}}^{\text{Corr}} = E_{\text{elst}, r}^{(12)} + E_{\text{exch}}^{(11)} + E_{\text{exch}}^{(12)} + {}^t E_{\text{ind}}^{(22)} + {}^t E_{\text{exch-ind}}^{(22)} + E_{\text{disp}}^{(20)} + E_{\text{exch-disp}}^{(20)}$$

$E_{\text{elst}}^{(10)}$  是经典的静电相互作用能,  $E_{\text{exch}}^{(10)}$  是 SAPT 定义的一阶交换能,  $E_{\text{ind}, r}^{(20)}$  为诱导能,  $E_{\text{exch-ind}, r}^{(20)}$  为交换-诱导能,  $\delta E_{\text{int}, r}^{\text{HF}}$  为所有三级和更高级诱导、交换-诱导的总和。

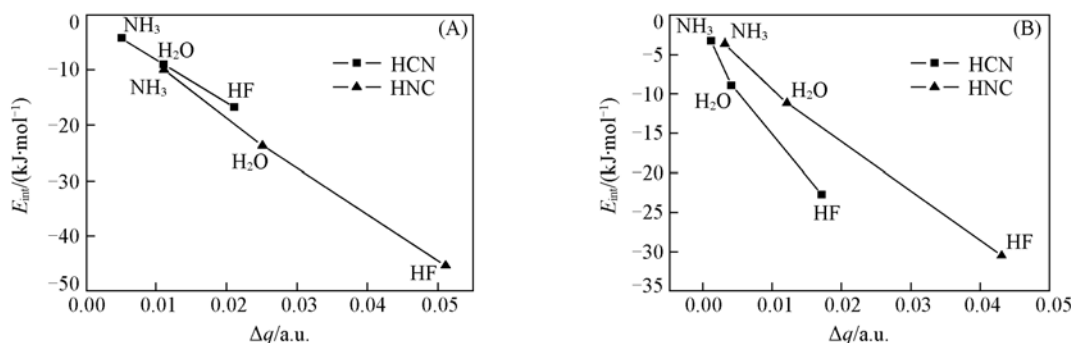
**Table 3** The composition of interaction energy to complexes obtained at the SAPT2/aug-cc-pVTZ level (kJ/mol)

Energy	H <sub>3</sub> N...	H <sub>2</sub> O...	HF...	H <sub>3</sub> N...	H <sub>2</sub> O...	HF...	HCN...	HCN...	HCN...	HNC...	HNC...	HNC...
	HCN	HCN	HCN	HNC	HNC	HNC	HNH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	HF	HNH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	HF
$E_{\text{int}}^{\text{HF}}$	-23.537	-19.571	-10.880	-37.532	-27.153	-13.923	-3.545	-10.295	-24.863	-2.596	-8.853	-23.617
$E_{\text{elst}}^{(10)}$	-46.828	-32.863	-17.117	-80.544	-51.715	-24.315	-11.039	-24.056	-45.023	-11.324	-25.954	-50.014
$E_{\text{exch}}^{(10)}$	37.879	21.569	9.643	79.161	43.719	17.660	10.166	20.770	39.024	11.503	25.197	49.520
$E_{\text{ind}, r}^{(20)}$	-16.327	-8.665	-3.983	-41.365	-20.896	-8.431	-3.060	-8.201	-21.615	-3.348	-10.446	-29.419
$E_{\text{exch-ind}, r}^{(20)}$	8.845	3.716	1.785	22.501	9.831	3.820	1.442	3.808	9.254	1.751	5.597	14.931
$\delta E_{\text{int}, r}^{\text{HF}}$	-7.102	-3.327	-1.212	-17.284	-8.097	-2.654	-1.049	-2.612	-6.504	-1.179	-3.244	-8.636
$E_{\text{elst}, r}^{(12)}$	3.156	3.515	2.157	-0.196	0.435	0.293	-0.497	-0.606	-0.184	-0.928	-1.488	-1.643
$E_{\text{exch}}^{(11)} + E_{\text{exch}}^{(12)}$	2.253	2.056	1.283	6.274	5.426	3.022	1.133	2.675	5.074	0.472	1.463	3.085
${}^t E_{\text{ind}}^{(22)}$	-0.447	-0.322	-0.284	-3.979	-2.805	-1.517	-0.251	-0.736	-1.158	-0.343	-0.736	-1.095
${}^t E_{\text{exch-ind}}^{(22)}$	0.242	0.138	0.125	2.165	1.321	0.690	0.117	0.343	0.497	0.180	0.393	0.556
$E_{\text{disp}}^{(20)}$	-12.310	-8.698	-4.878	-21.410	-14.041	-7.273	-6.613	-9.530	-12.757	-6.333	-9.852	-13.886
$E_{\text{exch-disp}}^{(20)}$	2.265	1.246	0.552	4.727	2.449	0.961	0.819	1.409	2.082	0.886	1.655	2.596
$E_{\text{int}}^{\text{Corr}}$	-4.845	-2.065	-1.045	-12.419	-7.215	-3.825	-5.288	-6.446	-6.445	-6.069	-8.561	-10.387
$E_{\text{int}}(\text{SAPT2})$	-28.382	-21.636	-11.925	-49.951	-34.368	-17.748	-8.832	-16.741	-31.308	-8.665	-17.414	-34.004
$E_{\text{int}}(\text{MP2})$	-28.478	-22.760	-13.345	-49.453	-36.445	-20.168	-9.856	-18.375	-33.239	-9.718	-19.199	-35.973

从电子相关能( $E_{\text{int}}^{\text{Corr}}$ )值可见,在讨论这些复合物中的分子间相互作用时,电子相关效应很重要。在电子相关能中,色散能 $E_{\text{disp}}^{(20)}$ 对电子相关能的贡献最大。为了便于说明问题,将表3中的数据总结成静电能[ $E_{\text{elst}} = E_{\text{elst}}^{(10)} + E_{\text{elst}}^{(12)}$ ]、诱导能[ $E_{\text{ind}} = E_{\text{ind}, r}^{(20)} + {}^t E_{\text{ind}}^{(22)}$ ]、交换排斥能[ $E_{\text{exch}} = E_{\text{exch}}^{(10)} + E_{\text{exch}}^{(11)} + E_{\text{exch}}^{(12)} + E_{\text{exch-ind}, r}^{(20)} + {}^t E_{\text{exch-ind}}^{(22)} + E_{\text{exch-disp}}^{(20)} + \delta E_{\text{int}, r}^{\text{HF}}$ ]和色散能[ $E_{\text{disp}} = E_{\text{disp}}^{(20)}$ ]。

从表3可见,静电能比交换排斥能小,因此,静电吸引能和交换排斥能的总和应表现为排斥作用。对 HCN(HNC) 作为质子供体形成的复合物,静电能对总相互作用能的贡献最大,贡献大小次序依次为: H<sub>3</sub>N—HNC(162%) > H<sub>2</sub>O—HNC(154%) > H<sub>3</sub>N—HCN(149%) > H<sub>2</sub>O—HCN(136%) > HF—HNC(135%) > HF—HCN(125%)。静电能对总相互作用能的贡献大小与原子电荷有关,原子电荷大则静电能对总相互作用能的贡献大,这与对原子电荷及分子间相互作用能( $\Delta E^{\text{CP}+\text{ZPE}}$ )的讨论结果一致。

诱导能对总相互作用能的贡献也非常显著,其对总相互作用的贡献大小依次为 NH<sub>3</sub>—HNC(91%) > NH<sub>3</sub>—HCN(59%) > HF—HNC(56%) > H<sub>2</sub>O—HNC(41%) > H<sub>2</sub>O—HCN(40%) > HF—HCN(36%)。诱导能主要来源于分子的最高占据轨道(HOMO)与最低空轨道(LUMO)之间的相互作用,它不但受占据轨道的影响,而且与质子受体的原子半径有关。质子受体的原子半径越小,越容易与质子产生氢键作用,从而交换排斥能越小,这就增强了轨道的重叠而导致较大的诱导能。综合表2及表3



**Fig. 2** The correlation between the induction forces and charges transfer

HCN(HNC) as the proton donor(A) or as the proton acceptor(B).

可以发现, 诱导能( $E_{\text{ind}}$ )与复合物的电荷转移具有良好的正相关性, 即复合物的电荷转移越多, 则诱导能就越高(图2)。色散能对传统氢键型的影响也是不可忽视的, 其对总相互作用能的贡献约为43%。

HCN(HNC)作为质子受体时, 复合物的能量分解结果与其作为质子供体的情形相似。静电能( $E_{\text{elst}}$ )对总相互作用能的贡献最大, 约为131%~157%; 诱导能对总相互作用能的贡献次之, 约为37%~90%; 色散能对总相互作用能的贡献则约为41%~75%。

总之, 在此类复合物的分子间相互作用中, 静电能和诱导能对总相互作用能的贡献占主导地位。此外, 从表3还可以看出, SAPT2得到的总相互作用能 $E_{\text{int}}$ (SAPT2)与MP2/aug-cc-pVTZ水平下得到的总相互作用能 $E_{\text{int}}$ (MP2)是相吻合的。这就说明用SAPT2方法在aug-cc-pVTZ水平上对标题复合物进行能量分解研究, 其结果是可靠的。

### 参 考 文 献

- [1] Jeffrey G. A. An Introduction to Hydrogen Bonding[M], New York: Oxford University Press, 1997
- [2] SHI Tu-Jin(石土金), WANG Xu(王栩), TIAN Zhi-Xin(田志新), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2004, **25**(1): 124—127
- [3] Milligan D. E., Jacox M. E. J. Chem. Phys. [J], 1967, **47**: 278—285
- [4] Samuels A. C., Jensen J. O., Krisnan P. N., *et al.* J. Mol. Struct. (Theochem.) [J], 1998, **427**: 199—209
- [5] Maki A. G., Sams R. L. J. Chem. Phys. [J], 1981, **75**: 4178—4182
- [6] ZHANG Qi-Bing(张奇兵), ZHAO Ming(赵明). M-Sized Nitrogenous Fertilizer Progress(中氮肥)[J], 2001, (6): 59—62
- [7] Wugt Larsen R., Hegelund F., Nelander B. J. Phys. Chem. A [J], 2005, **109**: 4459—4463
- [8] Li Ru-Jiao, Li Zhi-Ru, Wu Di, *et al.* J. Phys. Chem. A [J], 2003, **107**: 6306—6310
- [9] Boys S. F., Bernardi F. Mol. Phys. [J], 1970, **19**: 553—559
- [10] Jeziorski B., Moszynski R., Szalewicz K. Chem. Rev. [J], 1994, **94**: 1887—1930
- [11] Liu T., Zhu W. L., Gu J. D., *et al.* J. Phys. Chem. A [J], 2004, **108**: 9400—9405

## Theoretical Study on Intermolecular Interactions Between HCN(HNC) and NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, HF

WANG Zhao-Xu, ZHANG Jing-Chang, CAO Wei-Liang\*

(Institute of Modern Catalysis, State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering,  
Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract** *Ab initio* molecular orbital calculations including MP2 correlation energy was employed to optimize the geometries of the hydrogen-bonded complexes formed by HCN(HNC) with NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O and HF, respectively at aug-cc-pVTZ level. It was found that there were two kinds of stable complexes bonded by intermolecular hydrogen bonds: HCN(HNC) as the proton donor and as the proton acceptor. The effect of basis set superposition error on the total interaction energy is smaller than 3.34 kJ/mol. Natural bond orbital (NBO) analysis was performed to analyze the atomic charges and charges transfer in the monomers and complexes. The results of the decomposition of interaction energy according to SAPT2 show that the electrostatic and induction forces dominate the intermolecular interaction, and there is a good correlation between induction forces and charges transfer.

**Keywords** HCN(HNC); Intermolecular interaction; Basis set superposition error(BSSE); Natural bond orbital(NBO); Symmetry adapted perturbation theory(SAPT)

(Ed.: D, I)