

研究论文

类硅烯 $\text{H}_2\text{C}=\text{SiLiBr}$ 与 RH ($\text{R}=\text{F}, \text{OH}, \text{NH}_2$)的插入反应

李文佐*, a 程建波*, a 宫宝安 a 于健康 a, b 孙家钟 a, b

(a烟台大学化学生物理工学院 烟台 264005)

(b吉林大学理论化学计算国家重点实验室 长春 130012)

收稿日期 2008-1-23 修回日期 2008-10-10 网络版发布日期 2009-6-18 接受日期 2008-12-24

摘要

采用DFT B3LYP和QCISD方法研究了类硅烯 $\text{H}_2\text{C}=\text{SiLiBr}$ 与 RH ($\text{R}=\text{F}, \text{OH}, \text{NH}_2$)的插入反应. 在B3LYP/6-311+G(d,p)水平上优化了反应势能面上的驻点构型. 结果表明, $\text{H}_2\text{C}=\text{SiLiBr}$ 与 HF , H_2O 或 NH_3 发生插入反应的机理相同. QCISD/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311+G(d,p)计算的三个反应的势垒分别为148.62, 164.42和165.07 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 反应热分别为-69.63, -43.02和-28.27 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. 相同条件下发生插入反应时, 反应活性都是 $\text{H}-\text{F} > \text{H}-\text{OH} > \text{H}-\text{NH}_2$.

关键词

[类硅烯 \$\text{H}_2\text{C}=\text{SiLiBr}\$](#) [RH \(\$\text{R}=\text{F}, \text{OH}, \text{NH}_2\$ \)](#) [插入反应](#) [DFT](#) [QCISD](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李文佐 liwenzuo2004@126.com; chengjb@126.com

作者个人主页:

李文佐*; a 程建波*; a 宫宝安 a 于健康 a; b 孙家钟 a; b

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (284KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[类硅烯 \$\text{H}_2\text{C}=\text{SiLiBr}\$ ”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [李文佐, 程建波, 宫宝安, 于健康, 孙家钟](#)