

## 研究论文

### 磷炔 $R-C\equiv P(R=-BH_2, -CH_3, -NH_2, -OH)$ 及其异构体的稳定性

于海涛; 池玉娟; 傅宏刚; 李泽生; 孙家锺

黑龙江大学化学化工学院, 哈尔滨 150080; 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

采用B3LYP和CCSD(T)方法对 $R-C\equiv P(R=-BH_2, -CH_3, -NH_2, -OH)$ 体系进行了理论研究. 结果表明, 含 $C\equiv P$ 三键的异构体 $BH_2-C\equiv P$ 和 $CH_3-C\equiv P$ 在各自的体系中分别是热力学最稳定的结构. 而在 $HO-C\equiv P$ 和 $NH_2-C\equiv P$ 体系中, 热力学最稳定的结构却是 $H-P=C=O$ 和含 $C\equiv N$ 三键的 $N\equiv C-PH_2$ . 动力学理论研究表明, 没有相关实验研究的 $R-C\equiv P(R=-BH_2, NH_2)$ 体系中共有5种异构体是动力学稳定的. 在 $HO-C\equiv P$ 体系的2种动力学稳定的异构体中,  $H-P=C=O$ 连接方式的异构体已被实验所证实, 而另外一种 $HO-C\equiv P$ 连接方式的异构体的动力学稳定性较高, 实验中可以观察到. 对于 $CH_3C\equiv P$ 体系, 研究所预示的2种动力学稳定的异构体中 $CH_3-C\equiv P$ 已被实验证实, 从理论上推测另一种动力学稳定性较高的异构体 $HC\equiv C-PH_2$ 在实验中也可以检测到.

关键词: 磷炔 异构化 动力学稳定性

收稿日期 2002-06-04 修回日期 2002-07-15 网络版发布日期 2003-02-15

通讯作者: 傅宏刚 Email: fuhg@hlju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1280KB)

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

▶ 磷炔

▶ 异构化

▶ 动力学稳定性

本文作者相关文章

▶ 于海涛

▶ 池玉娟

▶ 傅宏刚

▶ 李泽生

▶ 孙家锺