

研究论文

$R_2C=GeH_2$ 和 $R_2Ge=CH_2$ 结构与成键特征的理论研究

耿志远*, 贾宝丽, 王永成, 姚琨, 方冉, 张兴辉

(西北师范大学化学化工学院 甘肃省高分子材料重点实验室 兰州 730070)

收稿日期 2006-1-6 修回日期 2006-4-30 网络版发布日期 2006-10-25 接受日期 2006-6-1

摘要 用密度泛函理论(DFT), 在B3LYP/6-31+G(d, p)水平上研究了取代基对二取代锗烯 $R_2Ge=CH_2$

和 $R_2C=GeH_2$ [R=H, OH, NH_2 , SH, PH_2 , F, Cl, Br, (NHCH) $_2$, CH_3 , (CH) $_2$]的影响.

研究发现 π 供电子取代基在碳上时更能引起分子结构在锗端的锥型化.

碳原子上的 π 电子给予取代基的给电子效应越强, R_2C 的单-三态能量差越大, π 电子的反极化效应就越强,

使得化合物的结构在锗端发生的弯曲越明显, 从而使得弯曲结构更稳定. 和前人的计算相比,

碳上的给电子取代基对 GeH_2 结构影响大于它对 SiH_2 的影响.

关键词 [密度泛函理论](#) [锗烯](#) [反极化效应](#)

分类号

Theoretical Study on the Structure and Bonding Character of the $R_2Ge=CH_2$ and $R_2C=GeH_2$

GENG Zhi-Yuan*, JIA Bao-Li, WANG Yong-Cheng, YAO Kun, FANG Ran, ZHANG Xing-Hui

(Gansu Key Laboratory of Polymer Materials, College of Chemistry and Chemical Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070)

Abstract Substituent effects on the disubstituted heavier analogues of $R_2C=GeH_2$ and $R_2Ge=CH_2$ [R=H, OH, NH_2 , SH, PH_2 , F, Cl, Br, (NHCH) $_2$, CH_3 , (CH) $_2$] were investigated using density functional theory [B3LYP/6-31+G(d, p)].

The major conclusion was that the stronger the π -donation of the substituents, the larger the ΔE_{ST} of CR_2 and the stronger the π -electron reversed-polarization effect. As the π -electron reversed-polarization effect increased, the distortion of GeH_2 fragment increased, and the stability of the bent structure increased. In addition, the π -electron-donating substitution at the carbon atom was more effective at inducing a bent structure than at the Ge atom. In contrast to the $R_2C=SiH_2$ system, the π -electron-donating substituents at the carbon atom have more effective influence on inducing GeH_2 a bent structure than that of SiH_2 .

Key words [density functional theory \(DFT\)](#) [germene](#) [reversed polarization effect](#)

DOI:

通讯作者 耿志远 zhiyuangeng55@163.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(372KB\)](#)

▶ [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“密度泛函理论” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [耿志远](#)
- [贾宝丽](#)
- [王永成](#)
- [姚琨](#)
- [方冉](#)
- [张兴辉](#)