

(BCO)₁₂与(CH)₁₂稳定性的环张力分析

崔小英, 贾建峰, 杨斌盛, 武海顺

山西大学分子科学研究所, 太原 030006; 山西师范大学化学与材料科学学院, 山西 临汾 041004

摘要:

基于密度泛函理论的B3LYP方法, 对具有等圈相似性的(BCO)₁₂和(CH)₁₂的10种异构体结构的稳定性进行了计算对比研究. 这10种异构体由三元、四元、五元和六元环组成. 环张力分析表明对碳基硼笼体系, 三元环起主要的稳定化作用, 而四元环是张力的主要来源. 对碳氢笼体系, 五元环起主要的密度表明碳基硼笼中的三元环与碳氢笼中的三元环有不同的电子结构, 导致了它们不同的张力表现. 核独立化学位移(NICS)分析表明, 尽管σ芳香性不是稳定性的决定因素, 但对笼的稳定性有一定的影响.

关键词: 稳定性 碳基硼 碳氢笼 张力环 核独立化学位移

收稿日期 2009-06-08 修回日期 2009-09-01 网络版发布日期 2009-10-20

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@mail.sxnu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 刘奉岭. C₆₀分子间相互作用的Morse势函数及应用[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 967-972
2. 高扬; 赵璧英; 唐有祺. 氧化物表面单层改性对SnO₂超微粒子热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997, 13(02): 97-100
3. 周灵萍; 李伟; 陶克毅; 李赫哩; 李立文. NaBr/KY催化剂在甲苯氧化甲基化反应中的稳定性[J]. 物理化学学报, 2002, 18(10): 916-919
4. 徐旭; 曹娟; 朱莉芳; 高晨阳. 二氧化硅纳米管的稳定性及尺寸效应[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 451-455
5. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和; PuX+(X=H, O, N, C)的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 622-625
6. 王树国; 吴东; 孙子罕; 钟炳; 邓凤; 岳勇; 罗晴. MCM-48介孔分子筛的高压合成[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 659-661
7. 胡伟; 叶致强; 吴树森; 刘洪来. 水相中乙醇对胶体泡沫性质的影响 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 122-126
8. 郑康成; 饶火瑜; 何峰; 许值涛; 刘汉钦. Fe、Co、Ni双卤烷基配合物从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 299-304
9. 陈福良; 王仪; 郑斐能; 梁文平. 微乳剂低温稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 661-664
10. 李维忠; 缪方明. 溶剂化对修饰超氧化物歧化酶稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 289-292
11. 李光平, 张华北, 田安民, 郇国森. AlC_n及AlC_n⁺ (n=1-4)原子簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 211-217
12. 张菊, 郑小明, 吴念慈, 丁云杰. NiCoB超细非晶合金的化学制备和热稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 113-117
13. 夏海涛, 林华宽, 陈荣锦. 铂(II)-吡啶-*o*-氨基苯的热力学和动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 74-78
14. 贤景春; 朱守荣; 林华宽, 陈荣锦. 配位化学中的直线自由能关系(XIX)[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 841-846
15. 谢志明; 高疆; 李卓美. 丙烯酸酯共聚物无皂水凝胶稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 438-443
16. 高海蓉; 余敏; 应立明; 高盘良; 赵新生. \bar{A}^3E 态CH₃N自由基的稳定性[J]. 物理化学学报, 1993, 9(05): 594-596
17. 林华宽; 朱守荣; Appolin, B. Kondiano; 寇福平; 陈荣锦. 铜(II)-5-取代邻菲罗啉-二氧四酸大环三元体系的稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 417-424
18. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. 样品价态对激光气产生Cu/Cl团簇的组成和稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 933-937
19. 马文瑾; 武海顺. Al_mN₂⁻ (m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 178-182
20. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 周伟良. 金属硼化物结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 258-263
21. 严宾; 安学勤; 白晶; 张英华. 超临界CO₂法制备头孢唑啉树脂体[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 226-229
22. 高恩君; 丁丽娜; 刘祁涛; 孙亚光. 把(II)三元配合物稳定性及其与DNA作用研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1091-1095
23. 许梦清; 左晓奇; 李伟; 周豪杰; 刘建生; 袁中直. 丁磺酸内酯对锂离子电池性能及负极界面的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 335-340
24. 单新丽, 王建平, 刘妍, 张兴祥. 丙烯酸共聚物囊壁的二十八烷微胶囊的制备和性能表征[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2590-2596
25. 杨小红; 王左友; 王彤彤; 黄伟国; 罗旭; 卓海涛. 新型型铁(VI)电池正极材料的制备及性能研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1150-1153
26. 李增和; 银陈; 王如璠; 王平; 郭洪猷. Co(μ₂-bpy)V₂O₆ (bpy = 4,4'-吡啶啉)的水热合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1133-1137
27. 杨刚; 王妍; 周丹红; 庄建勤; 刘宪春; 韩秀文; 包信和. La/ZSM-5分子筛热稳定性及镧存在形态研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 60-64
28. 许一婷; 戴李宗; 何云游; Tahina Rakotoarsoa1; Jean Yves Gal; 吴辉煌. 聚苯胺衍生物膜修饰电极的电化学和催化性质 [J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 564-568
29. 张彩云; 武海顺. 硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(02): 118-122
30. 杨锐; 何水祥; 顾爱萍; 文振翼; 林翔; 文辉忠. 三元配合物的合成、热稳定性及生物活性[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 610-615
31. 郑均林; 张晖; 魏伟; 吴: 孙子罕; 邓凤; 罗晴; 岳勇. 具有强酸性位的高水热稳定介孔分子筛的合成[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 907-912
32. 马文瑾; 武海顺. Al_mN₂ (m=1~8)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 290-295
33. 曾籍; 王春明; 尉继英; 朱月香; 谢有畅. 耐高温高比表面氧化铝/氧化铝体系的制备和表征[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 251-255
34. 张彩云; 崔丽亚; 武海顺. 内含式复合物X@(HAINH)₁₂ (X=Be, Mg, Ca, Zn, Al⁺, Ga⁺)的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 405-410
35. 文莉; 林种玉; 周剑奇; 古萍英; 傅锦坤; 林仲华. 用辛酸基醇酐单层保护Au纳米粒子制备CO氧化催化剂Au/γ-Al₂O₃ [J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 581-586
36. 耿春宇; 丁丽娜; 韩清珍; 温浩. 气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 595-600
37. 梁初; 黎光旭; 蓝志强; 刘奕新; 韦文德; 郭进. LiAlH₄与Li₃AlH₆的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 686-690
38. 李志伟; 赵存元; 陈六平. As₅⁻、[As₅M]⁻、[As₅MAs₅]²⁻ (M=Ti, Zr, Hf)的结构和芳香性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 755-759
39. 潘海波; 王芳; 黄金陵. 原位合成CoPc/SnO₂的键合特性及可见光催化活性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 992-996
40. 艾洪奇; 杨爱彬; 李允刚. 溶液中Zn²⁺与腺嘌呤异构体间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1047-1052
41. 王亚明; 刘岚; 罗远芳; 贾德民. 氟橡胶/改性乙丙橡胶并用胶的热稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1100-1104
42. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳宾; 武海顺. C_nAl₂ (n=1-10)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1477-1480
43. 田真宇; 许旋. 配合物[M(CO)₃(PPh₃Py)₂](M=Fe, Ru)异构体的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1482-1486
44. 史艳华; 孟惠民; 孙冬柏; 俞宏英; 付花荣. 脉冲阳极电沉积制备锰氧化物涂层电极[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1199-1206
45. 黄银燕; 赵璧英; 谢有畅. 复合固体超强催化剂SO₄²⁻-WO₃-ZrO₂的结构研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(06): 547-552
46. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In_nNa和In_nNa⁺ (n=2-8)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 261-266
47. 刘沛妍, 褚莹, 吴子生, 严忠, 康万利. 液膜稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(04): 320-324
48. 朱永法; 叶小燕; 姚文清; 陈德朴; 曹立礼. Ar离子束作用下C₆₀薄膜的结构稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(08): 699-703
49. 陶长元; 颜红梅; 刘信安; 张胜涛; 罗久里. 酸度对B-Z振荡反应的影响[J]. 物理化学学报, 2000, 16(09): 835-838
50. 安增建; 周娜; 董锡高; 蔡天锡. 热稳定性良好的磺化聚醚醚酮催化剂[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 654-656
51. 马文瑾; 武海顺. Al_mN (m=2~9)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 927-932
52. 王利江; 张聪杰; 武海顺. C_nB^δ (δ=0, ±1; n=1~6)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005, 21(03): 244-249
53. 张荣斌; 李凤仪; 杨美华. 载体γ-Al₂O₃和钐对非晶态NiB合金热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 970-973
54. 范荫桓; 廖世雄; 余道容. 纳米氯化铀的热稳定性和化学反应活性[J]. 物理化学学报, 1998, 14(12): 1057-1060
55. 田欣欣; 张富强; 冯瑞娟; 武海顺. B₂₈N₂₈笼的稳定性及笼中四元环键联类型对笼稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(08): 937-941
56. 赫崇衡; 张文敏; 汪仁. 稀土修饰Al₂O₃的表面热稳定性[J]. 物理化学学报, 1996, 12(11): 971-975
57. 钱建刚; 顾惕人. 醋酸十二铈的吸附和SiO₂悬浮液的稳定性[J]. 物理化学学报, 1996, 12(08): 698-703
58. 胡洁; 袁安葆; 王玉芹; 王秀玲. 低热固相法制备纳米MnO₂/CNT超电容复合电极的循环稳定性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(05): 987-993
59. 黄小敏. 铈修饰Ir(CO)Cl₂(Ph₃Ppy)₂HgCl₂(HgCl₂)₂ (a, b=1, 2, c=0, 1)的Ir-Hg相互作用和氧化还原反应性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1362-1366
60. 李雷; 詹瑛瑛; 陈崇启; 俞育生; 林性怡; 郑起. 不同方法制备的CeO₂载体对CuO/CeO₂催化剂水煤气变换活性和稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1397-1404
61. 柯曦; 崔国峰; 沈培康. 钒铁合金催化剂的稳定性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 213-217
62. 程海斌; 王金铭; 马会娟; 侯朋; 官建国; 张清杰. 有机分子修饰铁粒子表面改善水基磁流变液的抗氧化性和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(10): 1869-1874
63. 梁云霄; 李森; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯C₂₀的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1647-1651
64. 刘红晶; 贺高红; 林畅; 赵薇; 肖公奎. W/O/W多重乳液中水传递的控制[J]. 物理化学学报, 2007, 23(06): 935-939

65. 殷开梁,邹定辉,张雪红,席海涛,夏庆. 含金纳米粒子链相关性探讨及其热稳定性的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1207-1212
66. 王艳宾;马文理;张静 武海顺. C_nAl ($n=2-11$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 873-876
67. 郭晋军;晨辉;其鲁. 锂离子动力电池电解液进展[J]. 物理化学学报, 2007,23(Supp): 80-89
68. 徐伯华;李来才;王欣;田安民. N_2H_2 异构体的结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 67-73
69. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰. $(Mn)_nH_m$ ($M=Ga, In; n=1-4; m=1, 2$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 257-262
70. 张静;王艳宾;武海顺. $(BCO)_n^+$ ($n=1-12$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
71. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家铎. HBO_2 异构体的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 87-90
72. 范荫恒;廖世健;张伟娜;徐杰;王复东. 纳米KH颗粒的热稳定性及其化学反应活性 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 55-58
73. 侯廷军;安钰;茹炳刚;徐筱杰. 三种金属硫蛋白动力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 221-225
74. 刘朝阳;黄荣彬;郑兰芬. C_nAl^+ ($n=1-11$)结构的量子化学从头计算[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 621-625
75. 周立新;黄尊行;田安民;吴立明;胡建明;李俊钱. C_4S^{m-4} 相对稳定性的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 752-756
76. 何煦;赵国玺;宋玉步瑶. 双月桂酸三乙醇胺水溶液的囊泡性质研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 509-513
77. 陈兆旭;肖鹤鸣;高宝华. 西唑及其衍生物的理论研究(6) [J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 757-764
78. 高洁;王世忠. 二甲醚燃料电池复合银阳极的研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 851-855
79. 肖建华;李雪峰;郑莎;徐建昌;王乐夫. $Mn/Ba/Al_2O_3$ 催化剂的NOx氧化、储存和耐硫性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 815-819
80. 王利江;张聪杰. $B_2C_n^+$ ($n=1\sim 9$)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
81. 李啸风;陈志荣;刘迪霞;潘海华;李浩然;韩世钧. 乳化剂初始位置对乳液液稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 964-967
82. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖. PuO^{n+} 的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
83. 张晓涛;贾建峰;武海顺;裴晓琴. 羰基硼化合物 $(BCO)_n$ ($n=1\sim 12$)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
84. 刘海波;侯占佳;刘丽英;徐志凌;徐雷;王文澄;李富铭;叶明新. 三聚氰胺甲酯树脂的光学性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 563-567
85. 刘勇;王敬先;杨竹仙;何阿弟;陈晓银. 银对氧化铝的高温热稳定作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 533-537
86. 张建业;李宣文;刘兴云. β -沸石骨架稳定性与表面酸性的红外光谱研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1092-1097
87. 李权;徐成刚;王艳艳;朱正和. PuH_2 气态分子热力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 952-955
88. 刘东艳;樊彦贞;张因力;王桂香;吴东;任杰. 碱土金属修饰 Al_2O_3 的表面热稳定性[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 1036-1039
89. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;李泽生;孙家铎. 磷烷 $R-C\equiv P(R=-BH_2, -CH_3, -NH_2, -OH)$ 及其异构体的稳定性[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 125-129
90. 王邦宁;韩布兴;谈夫. 溶液组成对乌头碱构象热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 284-288
91. 王著;朱灵峰;张国宝;赵根锁;朱斌. 改性羧甲基羟丙基田菁胶热裂解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(07): 598-603
92. 李思殿;R.约翰斯顿;J.莫诺. 锡原子簇的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 642-649
93. 朱宏耀;江元生. 简单晶格的簇—Bethe格模型[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 473-477
94. 林华宽;刘在均;唐祥海;陈荣梯. 配合物中直线自由能关系的进一步探讨[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 565-568
95. 张迪倡;余保宁;金泽明;田敏;闵恩泽. 稀土(Y、Ce、Sm)对Ni-P非晶态合金热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 325-330
96. 阙锦晴;穆绍林. 聚羧酸尿酸酶电极性能的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 345-350
97. 史扬;张南;高振;朱起鹤;孔繁放. 铝硫二元团簇的组分及其光解规律[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 299-301
98. 赵东源;杨亚书;郭双双;王国甲. 铁铝复合柱撑粘土的制备、柱结构和稳定性(I)[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 193-199
99. 张河哲;白光月;王玉洁;严忠. 动态单滴法研究乳液液膜的稳定性[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 233-237
100. 冯克;曾兆华;李卓美. 含不同金属离子的EPDM磺酸盐离聚物的研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 370-375
101. 汤大新;董玺娟;王卉;白玉白;李丽华;李铁津. 10,12-双炔甘三酸铝盐LB膜的FT-IR光谱[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 394-397
102. 杜少斌;王瑾;马福泰;郑洪元;楼辉;敬承衡. La-Mn-Ni-O催化剂组成、结构、还原性能及氧化活性[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 630-635
103. 郭宁;曾广赋;席时权. 四氯合铜酸二烷基铵相变的热分析和红外光谱[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 783-788
104. 蔡国强;董南. 乙醛二聚体的从头计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 270-275
105. 贾建峰;武海顺. BN纳米管内含C纳米管——结构与电学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1520-1525
106. 李权;李德华;盛勇;朱正和. PdY^{n+} ($n=0, 1, 2, 3$)分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
107. 郭荣. 直链醇链长对层状液晶结构与稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 703-707
108. 马文理;王艳宾;张静;武海顺. BmN ($m=2\sim 9$)团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172
109. 杜新贞;周峰;陶小娟;王芳平;陈慧. 修饰 β -环糊精/4-(N,N-二甲氨基)-苯甲酸-2'-乙基己基酯型包结物研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1065-1070
110. 温兆银;林祖疆;陈昆刚. 一种层状化合物的水热合成及其特性[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 876-880
111. 李贵安;朱庭良;叶录元;邓仲勋;张亚娟;焦飞;郑海荣. 原位法常压干燥制备疏水 SiO_2 气凝胶及其热稳定性[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1811-1815
112. 詹卫仲;潘石;李源作;陈茂笃. 二氯吡啶染料用于染料敏化太阳能电池光敏剂的比较[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2087-2092
113. 吕雪川;谭志诚;高肖汉. 新型铜三元配合物 $La(Glu)(Im)_2(ClO_4)_3 \cdot 4HClO_4 \cdot 4H_2O$ 的合成和热化学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 1945-1950
114. 王晓文;周正发;任风梅;汪瑾;马海红;徐卫兵. 水溶性封闭异氰酸酯单体的解封动力学[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2181-2185
115. 刘瑞辉;张存满;马建新. 具有良好热稳定性的 Al_2O_3 改性 Fe_2O_3 基金属催化剂[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2261-2269