

硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性

张彩云; 武海顺

山西师范大学化学与材料科学学院, 临汾 041004

摘要:

在(n=0, -1, -2, -3, -4)簇合物几何构型及稳定性研究的基础上,进一步对它的各种内含式和外接式二十面体簇合物(X@B₁₂H₁₂和XB₁₂H₁₂, X=H⁺, Li⁺, He, Ne, BeO/2⁺, Na⁺, Mg²⁺)进行了优化和计算.发现在内含式结构X@B₁₂H₁₂中,当X=Li⁺, Be²⁺, Mg²⁺时,构型较稳定;在外接式结构中, XB₁₂H₁₂-(C_{3v})结构比XB₁₂H₁₂-(C_{2v})的结构稳定.通过IRC计算,确定XB₁₂H₁₂-(C_{2v})是X与B₁₂H₁₂作用生成产物XB₁₂H₁₂-(C_{3v})的一种过渡态.

关键词: 簇合物 结构和稳定性 核独立化学位移 能隙 包含能

收稿日期 2003-07-16 修回日期 2003-09-08 网络版发布日期 2004-02-15

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@dns.sxtu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 殷元骥, 李文, 汪汉卿. 簇合物Co₆(μ₃-E)₈(CO)₆(E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 151-156
2. 张华北, 田安民, 鄢国森. Li₂B₂的几何结构和垂直激发态光谱的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 142-146
3. 吴宝山; 刘启旺; 胡襄; 苏海全; 刘树堂; 金祥林. 四核钴羰基簇合物Co₄(CO)₈(μ-CO)₂(μ₄-PSR)₂的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994, 10(10): 882-886
4. 李光进; 郭燮贤; 藤本俊幸; 市川胜. Pt羰基簇合物在NaY内的合成机理[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 710-715
5. 张华北; 田安民; 鄢国森. Li₃Al和Li₂B₂的稳定性和垂直激发态光谱[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 481-483
6. 李光进; 杨亚书; 郭燮贤; 市川胜. 由分子筛笼内铂羰基簇合物得到的催化剂的分散度研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 549-554
7. 张华北; 梁国明; 田安民; 鄢国森. Li⁹元素簇合物的成键作用[J]. 物理化学学报, 1994, 10(04): 360-362
8. 刘春万; 王文亮; 李隽. 簇合物中锥形四重桥硫3d轨道成键的EHMO研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 130-134
9. 王泽新; 张文霞; 刁兆玉. 广义簇合物在非均匀几率密度下的生长[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 39-44
10. 张敬来; 王连宾; 吴文鹏; 曹泽星. 线性簇合物SC_{2n}S²⁻(n=1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
11. 余秀芬; 王哲民. 氧心羧桥异三核过渡金属簇合物[Fe₂MO(CH₃COO)₆Py₃]. Py(1, M=Mn; 2, M=Co; 3, M=Ni)和[Fe₂MO(CCl₃COO)₆(THF)₃](4, M=Mn; 5, M=Co; 6, M=Ni)电子光谱的研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(05): 577-581
12. 唐思清, 李慎敏, 杨忠志. 离子簇合物N⁺₂He_n(n=1, 2, 3)的*ab initio*研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 801-806
13. 陈忠; 叶剑良; 蔡淑惠; 周兴旺; 万惠霖; 郑发鲲; 黄锦顺. ⁵¹V NMR监测[VS₄CU_n](n<6)簇合物自兜反应过程[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 426-430
14. 丁二润; 吴树林; 李庆山; 殷元骥. 手性金属簇合物的合成、结构表征及其反应[J]. 物理化学学报, 1999, 15(03): 241-246
15. 刘启旺; 成庆民; 刘树堂; 胡襄; 黄小荣. 一种含桥基的三钴羟基硫簇合物的合成与结构[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 283-287
16. 陆庆玮; 王一兵; 索全伶; 吴宝山; 孙杰. Fe₃(CO)₈(C₆H₅NC)(μ₃-S)₂的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1996, 12(06): 532-536
17. 张英; 周家驹; 李恩惠; 韦统师; 王云普; 许志宏. 应用有机结构数据库系统研究钼簇合物的键价规律[J]. 物理化学学报, 1992, 8(01): 27-32
18. 刘光华; 黎乐民; 徐光宪; 梁珍璇. 五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(01): 64-71

扩展功能

本文信息

PDF(1707KB)

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

▶ 簇合物

▶ 结构和稳定性

▶ 核独立化学位移

▶ 能隙

▶ 包含能

本文作者相关文章

▶ 张彩云

▶ 武海顺

