

类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 与 $RH(R=F, OH, NH_2)$ 的插入反应

李文佐; 肖翠平; 宫宝安; 程建波

烟台大学化学生物理工学院, 山东 烟台 264005; 吉林大学超分子结构与材料教育部重点实验室, 长春 130012

摘要:

采用DFT B3LYP和QCISD方法研究了不饱和类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 与 $RH(R=F, OH, NH_2)$ 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, $H_2C=GeLiCl$ 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173.53、194.48和209.05 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 反应热分别为60.18、72.93和75.34 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. 相同条件下发生插入反应时, 反应活性顺序都是 $H-F>H-OH>H-NH_2$.

关键词: 类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ $RH(R=F, OH, NH_2)$ 插入反应 DFT QCISD

收稿日期 2007-10-11 修回日期 2008-01-10 网络版发布日期 2008-02-27

通讯作者: 李文佐 Email: liwenzuo2004@126.com

本刊中的类似文章

1. 李文佐;谭海娜;肖翠平;宫宝安;程建波. 不饱和类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1811-1814

扩展功能

本文信息

PDF(208KB)

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

▶ 类锆烯 $H_2C=GeLiCl$
▶ $RH(R=F, OH, NH_2)$
▶ 插入反应
▶ DFT
▶ QCISD

本文作者相关文章

▶ 李文佐
▶ 肖翠平
▶ 宫宝安
▶ 程建波