

配合物[M(CO)₃(PPh₂py)₂](M=Fe, Ru)异构体的理论研究

田真宁; 许旋

华南师范大学化学与环境学院, 广东高校电化学储能与发电技术重点实验室, 广州 510006

摘要:

对PPh₂py配合物[M(CO)₃(PPh₂py)₂](M=Fe, Ru)的三种构型的异构体1-6进行了研究. 其中PPh₂py以两个P原子与M配位形成HH构型1(Fe)和4(Ru), 以一个P和一个N原子与M配位形成HT构型2(Fe)和5(Ru), 以两个N原子与M配位形成HH'构型3(Fe)和6(Ru). 结果表明, (1) PPh₂py中P原子对HOMO轨道的贡献最大, PPh₂py作为电子给体时易以P原子与金属原子结合. (2) 从分子能量和相互作用能数据表明, 配合物中HH构型最稳定, HH'构型最不稳定, 这与合成产物为HH构型的结果一致. (3) 键长和Wiberg键级均表明P—M键比N—M键结合力强. P、M原子间存在σ键, 而N、Fe原子间仅存在nN→n*M或nN→σ*M-P的电荷转移作用. (4) HH构型中M对HOMO的贡献最大, PPh₂py向M的电荷转移最强, 使M的负电荷最大, 故HH构型最易作为电子给体以M原子与第二个金属配位形成双核配合物.

关键词: DFT(PBE0) NBO 二苯基吡啶膦 有机金属配合物 稳定性

收稿日期 2008-01-18 修回日期 2008-03-25 网络版发布日期 2008-05-12

通讯作者: 许旋 Email: xuxuan@scnu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 李勤瑜; 许旋. 配合物[Fe(CO)₃(PPh₂R)₂(HgCl₂)] (R=pym, fur, py, thi)的Fe—Hg相互作用及³¹P化学位移[J]. 物理化学学报, 2007, 23(12): 1875-1880

扩展功能

本文信息

PDF(1382KB)

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

▶ DFT(PBE0)

▶ NBO

▶ 二苯基吡啶膦

▶ 有机金属配合物

▶ 稳定性

本文作者相关文章

▶ 田真宁

▶ 许旋