

研究论文

卤代硅烷(R_3SiX)与 NR'_3 形成五配位硅化合物的加成反应

贝逸翎; 主沉浮; 刘庆阳; 戚桂斌

山东大学化学与化工学院, 济南 250100

摘要:

对 R_3SiX ($R=H, CH_3$; $X=F, Cl, Br, I$)与 NR'_3 ($R'=H, CH_3$)的加成物用量子化学密度泛函方法在B3LYP/6-31g(d,p)基组下(X 原子采用cep-121g基组)进行了两种加成方式的研究. 一种是 NR'_3 沿 $Si-X$ 键轴向位置的加成, 另一种是 NR'_3 沿 $Si-X$ 键侧向接近的加成. 计算结果表明, 前者更稳定且更容易形成加成物; Si 上斥电子基团不利于 $Si-N$ 键的形成, 而 N 上斥电子基团则有利于 $Si-N$ 键的形成; NH_3-H_3SiX 系列和 $N(CH_3)_3-H_3SiX$ 系列均能以两种方式进行加成, $NH_3-H_2(CH_3)SiX$ 系列仅能沿 $Si-X$ 键轴向进行加成, 而 $NH_3-H(CH_3)_2SiX$ 和 $NH_3-(CH_3)_3SiX$ 系列两种方式都不能进行加成; 在同系列加成产物中, 以 $X=Cl$ 时所得加成物最稳定. 讨论了所有加成物中各键的性能、NBO电荷变化、取代基对加成物结构和稳定性的影响, 并对 H_3SiX ($X=F, Cl, Br, I$)与 NH_3 及 $N(CH_3)_3$ 加成物在有机溶剂中导电的可能性进行了讨论.

关键词: 卤代硅烷 密度泛函理论 成键性能 NBO电荷 导电性

收稿日期 2007-07-16 修回日期 2007-11-01 网络版发布日期 2007-12-13

通讯作者: 主沉浮 Email: chenfuz@sdu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(173KB)

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

▶ 卤代硅烷

▶ 密度泛函理论

▶ 成键性能

▶ NBO电荷

▶ 导电性

本文作者相关文章

▶ 贝逸翎

▶ 主沉浮

▶ 刘庆阳

▶ 戚桂斌