

硅甲基硼烯异构化反应机理研究所

孙华斌,刘成卜,丁世良,邓从豪

中国人民解放军济南军区后勤部军事医学研究;山东大学化学学院理论化学研究室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用量子化学理论方法研究了硅甲基硼烯( $\text{SiH}\sim\text{3B}$ )单重态和三重态异构化反应,计算了有关化合物的电子结构,优化了过渡态构型,讨论了两个反应的控制类型。

关键词 [反应机理](#) [电子结构](#) [从头计算法](#) [异构化](#) [硅甲基硼烯](#) [过渡态构型](#)

分类号 [0641](#)

## Theoretical study of the isomerizations of singlet and triplet silyl borene

SUN HUABIN,LIU CHENGBU,DIN SHILIAN,DENG CONGHAO

**Abstract** The isomerizations of singlet and triplet silylborane(1) ( $\text{SiH}_3\text{B}$ ) have been studied by means of theor. method of quantum chem. The optimized geometries of the transition states and the electron structures of related species have been obtained. The factors controlling these isomerizations have been discussed.

**Key words** [REACTION MECHANISM](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [ISOMERIZATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“反应机理”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [孙华斌](#)
- [刘成卜](#)
- [丁世良](#)
- [邓从豪](#)