

α -Keggin结构钼硅四电子杂多蓝的量子化学研究

王恩波,王力耕,王惠忠,王作屏,张保建,赵成大

东北师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用半经验的INDO法,首次完成了 α -Keggin结构钼硅四电子杂多蓝 $K\sim 3H\sim 5[SiMo^{IV}\sim 4-Mo^{VI}\sim 8O\sim 4\sim O]_{12}H\sim 2O$ 量子化学计算,获得102个成键轨道和68个反键轨道,轨道能级,键序及电荷等数据,证明了杂多酸盐还原产物杂多蓝,还原后Keggin结构阴离子中各原子上电子云密度重新分配,产生一定程度的结构畸变,但仍保持 α -Keggin结构,最高占据轨道由组成分子的原子的轨道组成,其中的桥氧(O $\sim b'O\sim c$)成分较多,表明O $\sim b'O\sim c$ 为分子中的主要化学活性点HOMO和LUMO为负值,表明仍可进一步接受电子生成四电子以上的杂多蓝,Mulliken分析进一步证明了还原钼原子的位置.

关键词 [分子轨道](#) [量子化学](#) [钼络合物](#) [硅络合物](#) [INDO](#) [杂多蓝](#) [杂多酸盐](#) [KEGGIN结构](#)

分类号 [0641](#)

The quantum study on four-electron heteropoly blue of α -keggin structure

WANG ENBO,WANG LIGENG,WANG HUIZHONG,WANG ZUOPING,ZHANG BAOJIAN,ZHAO CHENGDA

Abstract Semiempirical INDO method has been used for calcns. on four-electron Keggin structure heteropoly blue molybdosilicate. The frontier mol. orbitals, orbital energies, bond orders, and atomic charges have been obtained. It is indicated that the structure of the heteropoly blue molybdosilicate with Keggin structure is distorted. The highest occupied orbitals in which there is more composition of bridge oxygen Ob and Oc are consisted of orbitals of all atoms in the mol. Mulliken anal. shows that the reduced Mo atom has more neg. charge.

Key words [MOLECULAR ORBIT](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [MOLYBDENUM COMPLEX](#) [SILICON COMPLEX](#) [HETEROPOLY BLUE](#)

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“分子轨道” 的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [王恩波](#)
- [王力耕](#)
- [王惠忠](#)
- [王作屏](#)
- [张保建](#)
- [赵成大](#)