

## 内含式化合物 $X@B_{12}P_{12}$ 的结构与稳定性研究

武海顺; 张竹霞

山西师范大学材料化学研究所, 临汾 041004

摘要:

采用B3LYP/6-31G\*方法, 对内含式化合物 $X@B_{12}P_{12}$  ( $X=Li^{0/+}$ 、 $Na^{0/+}$ 、 $K^{0/+}$ 、 $Be^{0/2+}$ 、 $Mg^{0/2+}$ 、 $Ca^{0/2+}$ 、H和He)的不同对称性构型进行了计算, 讨论其最稳定构型的几何参数、布居分析、偶极矩、电离势、包含能、振动频率、能隙和自旋密度. 发现在 $X@B_{12}P_{12}$ 化合物中, 客体 $X=Li$ 、 $Na^{0/+}$ 、 $K^{0/+}$ 、 $Mg^{0/2+}$ 、 $Ca^{0/2+}$ 和He处在偏离笼的中心0.006 nm的半径内.  $Be^{2+}$ 沿着 $C_3$ 轴偏离中心点0.279 nm. 在 $Be@B_{12}P_{12}$ 和 $H@B_{12}P_{12}$ 的基态结构中, Be和H与笼上的B原子成键. 除 $Li@B_{12}P_{12}$ 、 $Be^{2+}@B_{12}P_{12}$ 和 $He@B_{12}P_{12}$ 外, 其余结构为 $C_s$ 对称稳定构型.

关键词: 内含式化合物 偶极矩 包含能 能隙 自旋密度

收稿日期 2004-09-03 修回日期 2004-12-02 网络版发布日期 2005-05-15

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@dns.sxtu.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(417KB)

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

▶ 内含式化合物

▶ 偶极矩

▶ 包含能

▶ 能隙

▶ 自旋密度

本文作者相关文章

▶ 武海顺

▶ 张竹霞