

硼烷分子中化学键性质的研究III. 锥型分子B₃H₆X的结构与成键特征

武海顺,周伟良

山西师范大学化学系;华东师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用MP2/6-31G方法,对三角锥型分子B₃H₆X(X=B²⁺, C⁻, N, O⁺, BH⁻, CH和NH⁺)及其碎片B₃H₆和X的结构进行了abinitio研究。结果表明,当X=NH⁺, O⁺和N时, B₃H₆基环上的端氢(Ht)朝着帽基X方向,而当X=CH, BH⁻, B²⁺和C⁻时, Ht却转向帽基X的方向。这种特征可用配位原子的电负性和配位原子轨道的弥散性给以说明。我们还进一步研究了B₃H₆X系列化合物的结合能和稳定性。

关键词 [稳定性](#) [化学键](#) [从头计算法](#) [硼烷](#) [结合能](#)

分类号 [0641](#)

Studies on the nature of chemical bonding in boranes

WU HAISHUN,ZHOU WEILIANG

Abstract Ab initio molecular orbital studies of pyramidal B₃H₆X structures (X=B²⁺, C⁻, N, O⁺, BH⁻, CH and NH⁺) indicate that, for structures where X=N, O⁺ and NH⁺, the terminal hydrogens (Ht) of the B₃H₆ ring are toward the direction of the apical X. In contrast, the Ht are found to be away from the capping group for X=B²⁺, C⁻, BH⁻ and CH. The binding energy of B₃H₆ ring with apical fragmentation X was calculated.

Key words [STABILITY](#) [CHEMICAL BONDS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [BORANE](#) [BINDING ENERGY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(332KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“稳定性”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [武海顺](#)

· [周伟良](#)