

论文

富勒烯衍生物C50X(X=SiH2, PH, S)的结构及稳定性的理论研究

许秀芳, 尚贞锋, 李瑞芳, 赵学庄

南开大学化学系, 天津 300071

摘要:

用从头算HF/3-21G方法研究了C50的环加成衍生物C50X(X=SiH2, PH, S)所有可能的异构体的结构与稳定性, 计算结果表明, SiH2基团、PH基团与S原子在C50上环加成的优先加成位置相同, 都为C3—C4类键和C4—C4类键, 并且相应形成[5,6]-闭环和[5,5]-闭环结构的最稳定异构体; 决定C50X(X=SiH2, PH, S)各异构体稳定性的主要因素, 因加成位置以及发生加成反应的C—C键的单双键类型的不同, 可能是张力、共轭效应或者二者的共同作用. 进一步比较了C50X(X=SiH2, PH, S)与C50X(X=CH2, NH, O)的结构和稳定性等, 并总结出规律性的结论, 即加成原子的大小和加成位置C—C键的类型是影响形成开环或闭环结构的C50环加成衍生物两种主要因素.

关键词: C50环加成衍生物 结构 稳定性

Theoretical Study of Structure and Stability of Fullerene Derivatives C50X(X=SiH2, PH, S)

XU Xiu-Fang\*, SHANG Zhen-Feng, LI Rui-Fang, ZHAO Xue-Zhuang\*

Department of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071

Abstract:

The structure and stability of all possible isomers of C50X(X=SiH2, PH, S) were investigated by ab initio HF/3-21G calculations. The calculation results indicate that the preferred position for cycloaddition of SiH2, PH, and S on C50 is consistent, i.e. on the C3—C4 and C4—C4 sites of C50, and the resultant most stable cycloaddition isomers are [5,6]-closed and [5,5]-closed structures. The main driving force governing the stability of the C50X(X=SiH2, PH, S) isomers is the strain, or the conjugative effect, or the combination of strain and conjugative effect, depending on the addition positions and the types of the attacked C—C bonds. Further, the structures and stabilities of C50X(X=SiH2, PH, S) are compared with those of the C50X(X=CH2, NH, O), and a general conclusion are drawn: the size of the attacking atom and the type of the attacked C—C bond are two decisive factors for the formation of open or closed structure of the C50X isomer.

Keywords: C50X(X=SiH2, PH, S) Cycloaddition derivative Structure Stability

收稿日期 2008-09-10 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 许秀芳, 赵学庄

作者简介:

参考文献:

Kroto H. W., Fischer J. E., Cox D. E.. The Fullerenes[M], Oxford: Pergamon Press, 1993

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(445KB)

[HTML全文](0KB)

参考文献[PDF]

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

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

▶ C50环加成衍生物

▶ 结构

▶ 稳定性

本文作者相关文章

▶ 许秀芳

▶ 尚贞锋

▶ 李瑞芳

▶ 赵学庄

▶ 许秀芳

▶ 尚贞锋

▶ 李瑞芳

▶ 赵学庄

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Billups W. E., Ciufolini M. A., Buckminsterfullerenes[M], VCH: Weinheim, 1993  
Hirsch A., The Chemistry of Fullerenes[M], Stuttgart: Thieme, 1994:  
Chuang S. C., Santhosh K. C., Lin C. H., et al.. J. Org. Chem.[J], 1999, 64: 6664—6669  
Westmeyer M. D., Rauchfuss T. B., Verma A. K.. Inorg. Chem.[J], 1996, 35: 7140—7147  
L Mei-Xiang(吕梅香), ZENG He-Ping(曾和平). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(2): 244—249  
Creegan K. M., Robbins J. L., Robbins W. K., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1992, 114: 1103—1105  
Elmes Y., Silverman S. K., Sheu C., et al.. Angew. Chem., Int. Ed. Engl.[J], 1992, 31: 351—353  
Weisman R. B., Heymann D., Bachilo S. M.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2001, 123: 9720—9721  
Krtschmer W., Lamb L. D., Fostiropoulos K., et al.. Nature[J], 1990, 347: 354—357  
HAO Ce(郝策), WU Shi(吴师), TENG Qi-Wen(滕启文), et al.. Acta Chim. Sinica(化学学报)[J], 1997, 55: 622—624  
Diederich F., Ettl R., Rubin Y., et al.. Science[J], 1991, 252: 548—551  
Smith III A. B., Strongin R. M., Brard L., et al.. J. Org. Chem.[J], 1996, 61: 1904—1905  
Banks M. R., Cadogan J. I. G., Gosney I., et al.. J. Chem. Soc., Chem. Commun.[J], 1995: 885—886  
Banks M. R., Cadogan J. I. G., Gosney I., et al.. J. Chem. Soc., Chem. Commun.[J], 1995: 887—888  
Diederich F., Isaacs L., Philp D.. Chem. Soc. Rev.[J], 1994: 243—255  
Guldi D. M., Hungerbühler H., Carmichael I., et al.. J. Phys. Chem. A[J], 2000, 104: 8601—8608  
Smith III A. B., Strongin R. M., Brard L., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1995, 117: 5492—5502  
Smith III A. B., Strongin R. M., Brard L., et al.. J. Chem. Soc., Chem. Commun.[J], 1994: 2187—2188  
Raghavachari K.. Chem. Phys. Lett.[J], 1992, 195: 221—224  
Raghavachari K., Rohlfing C. M.. Chem. Phys. Lett.[J], 1992, 197: 495—498  
Raghavachari K., Sosa C.. Chem. Phys. Lett.[J], 1993, 209: 223—228  
Piskoti C., Yarger J., Zettl A.. Nature[J], 1998, 393: 771—774  
XU Xiu-Fang(许秀芳), YANG Zuo-Yin(杨作银), WANG Gui-Chang(王贵昌). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2003, 24(4): 682—685  
ABLIKIM Kerim(阿布力克·克热木), CHEN Jia-Li(陈佳丽), ABLIMIT Abdukadir(阿布力米提·布都卡德尔). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2008, 29(9): 1810—1815  
JIA Hu-Sheng(贾虎生), WANG Li-Ping(王丽平), HAN Pei-De(韩培德), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(10): 1958—1961  
ABKLEIM Krem(阿布力克木·克热木). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(3): 488—493  
Xie S. Y., Gao F., Lu X., et al.. Science[J], 2004, 304: 699  
Xu X., Xing Y., Yang X., et al.. Int. J. Quantun. Chem.[J], 2005, 101: 160—168  
[30]Xu X., Shang Z., Li R., et al.. J. Mol. Struct. Theochem.[J], 2006, 760: 99—107  
Schleyer P. V. R., Maerker C., Dransfeld A., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1996, 118: 6317—6318  
[32]Frisch M. J., Trucks G. W., Schlgal H. B., et al.. Gaussian 03, Revision C.01[CP], Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2004  
[33]Haddon R. C.. Program POAV3, Release 3.0[CP], NT, March: AT & T Bell Laboratories, 1993  
[34]Lu X., Chen Z. F.. Chem. Rev.[J], 2005, 105: 3643—3696  
[35]Xu Z. J., Han J. G., Zhu Z. Y., et al.. J. Phys. Chem. A[J], 2007, 111: 656—665  
[36]Xu Z. J., Zhang W., Zhu Z. Y., et al.. Chem. Phys.[J], 2006, 331: 111—124  
[37]Lin T. T., Zhang W. D., Huang J. C., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2005, 109: 13755—13760  
[38]Hedberg K., Hedberg L., Bühl M., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1997, 119: 5314—5320

#### 本刊中的类似文章

1. 仇永清,牟莉,苏忠民,孙世玲,秦春生,王荣顺.  $H_3PAuR$ 型单核Au( I )配合物的结构和非线性光学系数的量子化学计算比较[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1703-1707
2. 周遗品,向梅梅,姜子德,李华平,孙伟,林海琳,范怀忠. 莲子草假隔链格孢毒素的分离纯化与结构鉴定[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1485-1487
3. 石磊,陈靠山,董群,方积年,丁侃. 柘树根多糖的分离纯化及结构表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1088-1091
4. 祁玉冬,叶光斗,李守群,徐建军. 无乳化剂乳液聚合制备高分子量聚乙烯醇[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2214-2218
5. 陈洁,李惟,喻凌,王丽萍. 合成Exendin-4的体外人血浆稳定性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 683-685
6. 李全阳,夏文水,徐德平. 一种乳酸菌胞外多糖糖链结构解析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 655-657
7. 张丽娟,董文萍,陈耀强,史忠华,刘志敏,赵明,龚茂初. 胶溶法制备改性氧化铝的结构及织构特点[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 968-970
8. 张丽娟,董文萍,陈耀强,史忠华,刘志敏,赵明,龚茂初. 胶溶法制备改性氧化铝的结构及织构特点[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 968-970
9. 郑燕玉,胡炳环,林金火. 用混合乳化剂UE20/PVA制备的水包油型生漆乳液的性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1466-1472
10. 欧阳生德,易院平,耿华,帅志刚. 扩展苯基衍生物分子器件的电子输运的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 952-954

11. 刘钰, 路福绥, 陈甜甜, 高翠丽, 朱恒营, 赵辉. 不同金属反离子对含高效氟氟氟菊酯乳液形成规律及其稳定性的研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 909-912
12. 刘悦, 刘志强, 李慧琳, 宋凤瑞, 刘淑莹. 传统中药甘遂根中二萜类化学成分的电喷雾质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1727-1735
13. 及媛媛, 王海军, 李元峰.  $A_{a1}D_{d1}-A_{a2}D_{d2}$ 型氢键体系的网络结构参数[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 506-509
14. 梁远军, 何军林, 徐亮, 张迪, 刘克良. 烷基修饰寡聚脱氧核苷酸磷酸残基的化学合成及稳定性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 467-471
15. 刘尚义, 曹瑛, 赵听友, 代先东, 钟明鼐, 范崇旭, 陈冀胜. 一种新型独特芋螺毒素的分离与结构鉴定[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1482-1484
16. 李亚丰, 张李梅, 柳春磊, 张帆, 邹晋, 孙金绪, 白元, 孙艳群, 田勇. 一维链状配位聚合物 $[Cu(en)_2]_2[Cu(en)_2, \alpha-As^{III}, V^{IV}, O_{4,3}, (HPO_4)] \cdot 8H_2O$ 的合成与晶体结构[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2260-2262
17. 张青山, 赵君波, 郭炳南, 吴锋. 一类新型二价离子液体的合成及其结构和性质关系的初步研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2304-2307
18. 张贻亮, 杨忠志. 异构现象与最大硬度原理[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1941-1944
19. 高波, 朱广山, 付学奇, 滕利荣, 陈静, 王春艳, 袁式纶. 介孔材料的修饰及固定青霉素酰化酶的稳定性研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1823-1826
20. 周杰, 孟庆繁, 田晓乐, 程瑛琨, 姜福佳, 李青山, 滕利荣. 一种中国林蛙抗菌肽的光谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1064-1068
21. 邱建丁, 梁汝萍, 莫金垣. 基于离散小波变换的蛋白质结构、功能与进化关系延时交叉相关分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 40-45
22. 杨冉, 陈晓岚, 李萍, 屈凌波. 荧光法研究三种黄酮小分子与溶菌酶的相互作用[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1673-1676
23. 于广利, 王莹, 赵峡, 高昊东, 管华诗. 一种碱溶性灰树花菌丝体多糖GFM2A的制备和结构表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 87-91
24. 王旭, 许莉, 张锐, 林瑞森. 甲酰胺在乙二醇-水混合溶剂中的稀释焓[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1752-1754
25. 宫杰, 刘洋, 王丽丽, 杨景海, 宗占国. 密堆积六方结构Ni纳米颗粒的制备与表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1232-
26. 黄端平, 徐庆, 张枫, 陈文, 刘韩星. 层状化合物 $La_2Ni_{1-y}Co_yO_{4+\delta}$ 的合成、结构与性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1807-1811
27. 毕云枫, 解桂秋, 高仁钧, 鲁静, 曹淑桂. 超嗜热酯酶APE1547中特殊位置氢键对酶活力和热稳定性的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1914-1916
28. 于广涛, 李飞, 于健康, 黄旭日, 孙家锤.  $NC_2S^+$ 离子的结构和稳定性的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1957-1961
29. 王继芬, 封继康. 二萜及其衍生物的结构优化、前线轨道及其性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 177-181
30. 王佩, 张艳, 杨振军, 张亮仁, 张礼和. 环腺苷二磷酸核糖类似物的合成、表征及性质[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 314-318
31. 杨丽艳, 黄琳娟, 王仲孚, 曹春阳, 孙文基. 山茱萸酸性多糖FCP5-A的分离纯化与结构表征[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 936-940
32. 施树云, 赵昱, 张宇平, 黄可龙, 刘素琴. 黑紫囊吾化学成分分离与鉴定[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 941-943
33. 宋相伟, 王雪丽, 熊新辉, 牛建丽, 王仕攀, 王丽萍, 李惟. Exendin-4类似物的生物活性及结构[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1163-1165
34. 鲍小平; 王磊; 王凯; 张智; 郭建平; 李早英. 钉叶麻轴向配合物的合成与结构表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1189-1193
35. 陈宝玲; 赵立新; 张冰; 陈玉强; 杨昕卉; 彭鸿雁; 金曾孙. 大功率激光制备a-C和a-C:H类金刚石膜的光学性能研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1012-1015
36. 王发祥, 夏立秋, 丁学知, 赵新民, 单世平, 莫湘涛, 张友明, 喻子牛. W544F定点突变提高苏云金杆菌Cry1Ac蛋白的稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 1999-2002
37. 燕永利, 何飞, 张家明, 屈撑圉, 张宁生. 单一非离子表面活性剂制备胶质气体泡沫的稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2044-2048
38. 赵莹, 孙家锤, 黄旭日.  $NC_3O$ 分子体系的异构化及其结构和性能的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2457-2461
39. 夏玮, 张文清, 罗国安. 桑叶多糖SJB的结构分析和蛋白酪氨酸磷酸酯酶PTP1B抑制活性[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2205-2208
40. 杨兰义, 张殊佳, 郑学仿, 尹红星.  $\beta$ -榄香烯含S, Se糖苷衍生物的设计合成[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2187-2190
41. 栗志, 韩玉民, 罗久里. 铂电极BZ反应系双电层稀疏区中的Turing结构[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 360-364
42. 田素燕, 李连之, 李海丽, 薛泽春, 杜为红. 重组人细胞红蛋白的表达纯化及谱学表征[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 483-488
43. 王一兵, 芦菲, 魏平慧, 席时权, 王海水. 2-十八烷基-7,7,8,8-四氰基对醌二甲烷和3,3',5,5'-四甲基联苯胺电荷转移配合物LB膜的制备和表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 935-938

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					ugg online ugg bc online buy ugg boot boots sale ugg boc cardy ugg boots l cardy tall ugg ugg boots ugg knightsb