

引用信息: Wu Hai-Shun; Xu Xiao-Hong; Zhang Cong-Jie; Zhang Fu-Qiang. Acta Phys. - Chim. Sin., 2002, 18(02): 127-130 [武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. 物理化学学报, 2002, 18(02): 127-130]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

(XN)4R4簇合物的结构与化学键

武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强

山西师范大学化学系, 临汾 041004

摘要:

用密度泛函理论, 在B3LYP/6-311G 水平上, 对(XN)4R4 (X=C, Si, Ge; R=H, CH₃, NH₂, OH)及合成的先驱化合物(XN)2R2进行几何构型、电子结构、振动频率和化学反应焓变等进行了研究. 结果表明, (RCN)₄比(CNR)₄更稳定. 所有簇合物的零点能E_{ZP}值, R=H时最小, R=CH₃时最大, R配位原子依次为C、N和O时, E_{ZP}值逐渐减小.

关键词: (XN)4R4立方簇 密度泛函理论方法 结构 化学键

收稿日期 2001-08-14 修回日期 2001-10-22 网络版发布日期 2002-02-15

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\(1221KB\)](#)

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

▶ [\(XN\)4R4立方簇](#)

▶ [密度泛函理论方法](#)

▶ [结构](#)

▶ [化学键](#)

本文作者相关文章

▶ [武海顺](#)

▶ [许小红](#)

▶ [张聪杰](#)

▶ [张富强](#)