

锆烯 $X_2Ge(X=H, CH_3, F, Cl, Br)$ 与乙烯环加成反应的量子化学研究

耿志远; 王永成; 汪汉卿

西北师范大学化学化工学院, 兰州 730070; 中国科学院兰州化学物理研究所, 兰州 730000

摘要:

利用量子化学密度泛函理论的B3LYP方法, 在6-311G**的水平上, 对锆烯 $X_2Ge(X=H, CH_3, F, Cl, Br)$ 与 C_2H_4 的环加成反应进行了计算研究. 结果表明, 锆烯的基态是单重态, 取代基的电负性越强, 单-三态的能量差越大; 控制反应的因素是电子效应, 而不是立体效应; 取代基的电负性越强, 反应的活化能越高, 放热越少; 该反应由两步组成, 第一步生成中间配合物, 是一个无势垒的放热过程, 第二步经过渡态生成产物.

关键词: 锆烯 乙烯 密度泛函理论(DFT) 环加成反应 组态混合模型

收稿日期 2004-04-14 修回日期 2004-07-08 网络版发布日期 2004-12-15

通讯作者: 耿志远 Email: zhiyuangeng@yahoo.com.cn

本刊中的类似文章

1. 方冉; 耿志远; 王永成; 张兴辉; 王冬梅; 高立国; 陈晓霞. 锆烯 X_2Ge 与环硫乙烷硫转移反应的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1331-1336
2. 李文佐; 肖翠平; 宫宝安; 程建波. 类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 与 $RH(R=F, OH, NH_2)$ 的插入反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 720-724
3. 李文佐; 程建波; 李庆忠; 宫宝安; 孙家钟. 溶液中类锆烯 $H_2GeClMgCl$ 的结构与异构化反应[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 121-125
4. 陈新 李瑛. 二氯乙烯锆烯与甲硫醚环加成的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(12): 2229-2235
5. 李文佐; 谭海娜; 肖翠平; 宫宝安; 程建波. 不饱和类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1811-1814

扩展功能

本文信息

PDF(1554KB)

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

▶ 锆烯

▶ 乙烯

▶ 密度泛函理论(DFT)

▶ 环加成反应

▶ 组态混合模型

本文作者相关文章

▶ 耿志远

▶ 王永成

▶ 汪汉卿