

内含式复合物 $X@(\text{HAINH})_{12}$ ($X=\text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}, \text{Al}^+, \text{Ga}^+$)的结构和稳定性

张彩云; 崔丽亚; 武海顺

山西师范大学化学与材料科学学院, 山西 临汾 041004

摘要:

在研究闭式多面体 $(\text{HAINH})_{12}$ 簇合物几何构型及稳定性的基础上, 用DFT的B3LYP方法在6-31G(d)的水平上, 对其内含式复合物 $X@(\text{HAINH})_{12}$ ($X= \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}, \text{Al}^+, \text{Ga}^+$)进行了构型优化和能量计算, 并讨论了稳定结构的几何构型、自然键轨道(NBO)、振动频率、能量参数及NMR数据与结构的关系. 用Gaussian 03的QST3方法确定了客体X通过笼面6-元环的迁移过渡态(TS)结构, 并用IRC方法对所得TS结构进行了验证. 最后得到内含式复合物 $X@(\text{HAINH})_{12}$ 结构在热力学和动力学上的稳定性信息, 其中复合物 $\text{Ga}^+@(\text{HAINH})_{12}$ 的结构相对最稳定.

关键词: 结构和稳定性 包含能 变构能 核独立化学位移 迁移过渡态

收稿日期 2007-10-12 修回日期 2007-11-06 网络版发布日期 2008-01-07

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@mail.sxnu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张彩云; 武海顺. 硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(02): 118-122

扩展功能

本文信息

PDF(693KB)

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

▶ 结构和稳定性

▶ 包含能

▶ 变构能

▶ 核独立化学位移

▶ 迁移过渡态

本文作者相关文章

▶ 张彩云

▶ 崔丽亚

▶ 武海顺