

引用信息: LI Wen-Zuo; CHENG Jian-Bo; GONG Bao-An; YU Jian-Kang; SUN Jia-Zhong. Acta Phys. -Chim. Sin., 2008, 24(05): 901-904 [李文佐;程建波;宫宝安;于健康;孙家钟. 物理化学学报, 2008, 24(05): 901-904]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 类硅烯 $H_2SiClBeCl$ 的结构及异构化反应

李文佐; 程建波; 宫宝安; 于健康; 孙家钟

烟台大学化学生物理工学院, 山东 烟台 264005; 吉林大学理论化学计算国家重点实验室, 长春 130012

### 摘要:

用DFT和QCISD方法研究了类硅烯 $H_2SiClBeCl$ 的构型与异构化反应. 结果表明, 类硅烯 $H_2SiClBeCl$ 有三种平衡构型, 其中四面体构型能量最低, 是其存在的主要构型. 对平衡构型间异构化反应的过渡态进行了计算, 求得了转化势垒. 计算模拟了最稳定构型的红外光谱.

关键词: 类硅烯 $H_2SiClBeCl$  B3LYP QCISD 异构化

收稿日期 2007-11-02 修回日期 2008-01-09 网络版发布日期 2008-03-17

通讯作者: 李文佐 Email: liwenzuo2004@126.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(184KB)

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

▶ 类硅烯 $H_2SiClBeCl$

▶ B3LYP

▶ QCISD

▶ 异构化

本文作者相关文章

▶ 李文佐

▶ 程建波

▶ 宫宝安

▶ 于健康

▶ 孙家钟