

研究论文

不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$ 的DFT研究

李文佐; 宫宝安; 程建波

烟台大学化学生物理工学院, 山东 烟台 264005; 吉林大学超分子结构与材料教育部重点实验室, 长春 130012

摘要:

用密度泛函理论方法, 在B3LYP/6-31+G(d, p)水平上研究了不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$ 的结构. 结果表明, 不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$ 共有四种平衡构型, 其中非平面的p-配合物型构型能量最低, 是不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$ 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. 计算预言了最稳定构型的振动频率和红外强度.

关键词: 不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$ DFT 异构化

收稿日期 2005-10-26 修回日期 2005-12-16 网络版发布日期 2006-05-31

通讯作者: 李文佐 Email: liwenzuo2004@126.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(189KB)

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

▶ 不饱和类硅烯 $H_2C=SiNaF$

▶ DFT

▶ 异构化

本文作者相关文章

▶ 李文佐

▶ 宫宝安

▶ 程建波