

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

[MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pb) 体系结构和稳定性的理论研究

贺海鹏, 崔中华, 丁益宏

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

利用B3LYP和CCSD(T)(单点)方法, 研究了含Si, Ge, Sn, Pb的六原子体系[MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup>中各个异构体的结构及稳定性. 研究表明, 尽管与[CAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup>一样也具有18个价电子, 但[MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pb)体系并不存在具有平面五配位结构的异构体, 其能量的全局极小点为具有C<sub>s</sub>对称性的蝶形异构体Int1, 这是由于中心原子M(Si, Ge, Sn, Pb)较大的体积显著破坏了[MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup>中平面五配位结构的稳定性所致.

关键词: [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pd); 平面五配位; 异构体; 热力学稳定性

Theoretical Studies on the Structures and Stabilities of [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pb)

HE Hai-Peng, CUI Zhong-Hua, DING Yi-Hong\*

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China

Abstract:

By means of the B3LYP and CCSD(T)(single-point) methods, we investigated the isomeric structures and thermodynamic stabilities of four hexa-atomic systems [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pb). The results show that although bearing the same 18-valence electrons as [CAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup>, all the [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pb) systems do not have a planar pentacoordinate M isomer. Instead, the global structure is a C<sub>s</sub>-symmetrized butterfly isomer Int1. This can be rationalized that the bulkier central atom M(Si, Ge, Sn, Pb) than C has significantly destructed the stability of the planar pentacoordinate structure of [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup>.

Keywords: [MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pd); Planar pentacoordinate; Isomer; Thermodynamic stability

收稿日期 2009-07-20 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20103003, 20573046, 20773054)和吉林省杰出青年基金(批准号: 20050103)、新世纪优秀人才支持计划(NCET)和教育部博士点基金(批准号: 20070183028)资助项目.

通讯作者: 丁益宏, 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事量子化学理论研究. E-mail: yhdd@mail.jlu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1] Hoffmann R., Alder R. W., Wilcox C. F. J. Am. Chem. Soc. [J], 1970, 92: 4992—4993
- [2] Hoffmann R. Pure. Appl. Chem. [J], 1971, 28: 181—194
- [3] Sorger K., Schleyer P. v. R. J. Mol. Struct. [J], 1995, 338: 317—346
- [4] Rottger D., Erker G. Angew. Chem. Int. Ed. [J], 1997, 36: 812—827
- [5] Choukroun R., Cassoux P. Acc. Chem. Res. [J], 1999, 32: 494—502
- [6] Siebert W., Gunale A. Chem. Soc. Rev. [J], 1999, 28: 367—371
- [7] Wu Y. B., Lu H. G., Li S. D., et al. J. Phys. Chem. A [J], 2009, 113: 3395—3402
- [8] Li X., Wang L. S., Boldyrev A. I., et al. J. Am. Chem. Soc. [J], 1999, 121: 6033—6038
- [9] Wang L. S., Boldyrev A. I., Li X., et al. J. Am. Chem. Soc. [J], 2000, 122: 7681—7687
- [10] Li X., Zhang H. F., Wang L. S., et al. Angew. Chem. Int. Ed. [J], 2000, 39: 3630—3632
- [11] Merino G., Mendez-Rojas M. A., Vela A. J. Am. Chem. Soc. [J], 2003, 125: 6026—6027
- [12] Pancharatna P. D., Mendez-Rojas M. A., Merino G., et al. J. Am. Chem. Soc. [J], 2004, 126: 15309—

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (576KB)

[HTML全文]

([\\${article.html\\_WenJianDaXiao}](#))  
KB)

参考文献 [PDF]

参考文献

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

[MAI<sub>5</sub>]<sup>+</sup> (M=Si, Ge, Sn, Pd); 平面五配位; 异构体; 热力学稳定性

本文作者相关文章

PubMed

- [13]Perez N., Heine T., Barthel R., et al.. Org. Lett.[J], 2005, 7: 1509—1512
- [14]Balzani V., Credi A., Raymo F. M., et al.. Angew. Chem. Int. Ed.[J], 2000, 39: 3348—3352
- [15]Stoddart J. F.. Acc. Chem. Res.[J], 2001, 34: 409—522
- [16]Thomas O. C., Zheng W. J., Bowen K. H.. J. Chem. Phys.[J], 2001, 114: 5514—5519
- [17]Exner K., Schleyer P. v. R.. Science[J], 2000, 290: 1937—1940
- [18]Wang Z. X., Schleyer P. v. R.. Science[J] 2001, 292: 2465—2469
- [19]Boldyrev A. I., Wang L. S.. J. Phys. Chem. A[J], 2001, 105: 10759—10775
- [20]Wang L. M., Huang W., Averkiev B. B., et al.. Angew. Chem. Int. Ed.[J], 2007, 46: 4550—4553
- [21]Averkiev B. B., Zubarev D. Y., Wang L. M., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2008, 130: 9248—9250
- [22]Schleyer P. v. R., Boldyrev A. I.. J. Chem. Soc. Chem. Commun.[J], 1991: 1536—1538
- [23]Boldyrev A. I., Li X., Wang L. S.. Angew. Chem. Int. Ed.[J], 2000, 39: 3307—3310
- [24]Pei Y., An W., Ito K., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2008, 130: 10394—10400
- [25]Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al.. Gaussian 03, Revision D.02[CP], Wallingford CT: Gaussian Inc., 2004
- [26]Ennington R. II, Todd K., Millam J., et al.. R., GaussView, Version 3.09[CP], Shawnee Mission KS: Semichem. Inc., 2003
- [27]Schaftenaar G.. MOLDEN3.4[CP], The Netherlands: CAOS/CAMM Center, 1998

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 3236