

- properties of diethylaluminum azide [J]. *Chin J Energetic Mater*, 1997, 5(1): 15-21.
- [6] GAO Zhan-xian, ZHANG Xiao-hang, FENG Li-chun. Studies of trimer-monomer equilibrium of diethyl aluminum azide[J]. *Chin J Inorg Chem*, 2002, 18(7): 654-658.
- [7] XIA Qi-ying, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Theoretical study on the structures and properties of the group III A metallic azide clusters [J]. *Chem J Chin Univ*, 2005, 26(5): 922-926.
- [8] XIA Qi-ying, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. DFT Study of diethylaluminum azide clusters: structures, energies, frequencies, and thermodynamic properties[J]. *Chin J Chem*, 2004, 22(11): 1245-1249.
- [9] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 98, Revision A. 7[CP]. Pittsburgh PA: Gaussian, Inc., 1998.
- [10] McMurrin J, Dai D, Balasubramanian K, et al. H_2GaN_3 and derivatives: a facile method to gallium nitride[J]. *Inorg Chem*, 1998, 37: 6638-6644.
- [11] Steffek C, McMurrin J, Pleune B, et al. Synthesis of Cl_2InN_3 , Br_2InN_3 , and related adducts[J]. *Inorg Chem*, 2000, 39: 1615-1617.
- [12] McMurrin J, Todd M, Kouvetakis J. Low temperature inorganic chemical vapor deposition of heteroepitaxial GaN [J]. *Appl Phys Lett*, 1996, 69: 203-205.
- [13] Kouvetakis J, McMurrin J, Steffek C, et al. Synthesis and structures of heterocyclic azidogallanes $[(CH_3)ClGaN_3]_4$ and $[(CH_3)BrGaN_3]_3$ en route to $[(CH_3)HGaN_3]_x$: An inorganic precursor to GaN[J]. *Inorg Chem*, 2000, 39: 3805-3809.
- [14] XIA Qi-ying, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. A density functional theory study of the structures and Properties of $(H_2AlN_3)_n$ ($n = 1$ to 4) clusters[J]. *J Phys Chem A*, 2004, 108: 2780-2786.
- [15] XIA Qi-ying, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. A density functional theory study of the structures and properties of $(H_2GaN_3)_n$ ($n = 1$ to 4) clusters[J]. *Int J Quantum Chem*, 2004, 100: 301-308.
- [16] Fischer R A, Sussek H, Miehr A, et al. Organoindium azides: new precursors to indium nitride[J]. *J Organomet Chem*, 1997, 548: 73-82.

叠氮二乙基铝和镓多聚体结构和性质的密度泛函理论研究

夏其英^{1,2}, 马登学², 杨吉民¹

(1. 临沂师范学院化学化工学院, 山东 临沂 276005;

2. 南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094)

摘要: 采用 DFT-B3LYP/SDD 方法系统研究了 $(Et_2MN_3)_n$ ($n = 1-3, M = Al, Ga$) 体系。二聚体 $(Et_2MN_3)_2$ 和三聚体 $(Et_2MN_3)_3$ ($M = Al, Ga$) 分别拥有四元环 M_2N_2 和六元环 M_3N_3 结构。与单体相比, 二聚体 $(Et_2MN_3)_2$ 和三聚体 $(Et_2MN_3)_3$ ($M = Al, Ga$) 的键长变化次序均为 $N_\alpha-M > N_\alpha-N_\beta > N_\beta-N_\gamma \approx M-C$ 。二聚体 $(Et_2AlN_3)_2$ 的结合能比 $(Et_2GaN_3)_2$ 低 $35.44 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, 而三聚体 $(Et_2AlN_3)_3$ 的结合能比 $(Et_2GaN_3)_3$ 低 $45.61 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。热力学性质表明叠氮二乙基铝和镓体系在 298.2 K 温度下均以二聚体为主。在低于 500 K 的温度下, 二聚化和三聚化反应在热力学上是有利的。

关键词: 物理化学; $(Et_2MN_3)_n$ ($n = 1-3, M = Al, Ga$); 密度泛函理论 (DFT); 结合能; 热力学性质

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A



《含能材料》进入 Elsevier 重要数据库 SCOPUS

基于多种因素, Elsevier Inc 对旗下电子资源 Elsevier EI 进行了调整, 《含能材料》目前进入 Elsevier 下重要数据库 SCOPUS。

Scopus(www.scopus.com) 于 2004 年 11 月正式推出, 是目前全球规模最大的文摘和引文数据库。Scopus 涵盖了由 4000 多家出版商出版发行的科技、医学和社会科学方面的 15,100 多种期刊。相对于其他单一的文摘索引数据库而言, Scopus 的内容更加全面, 学科更加广泛, 特别是在获取欧洲及亚太地区的文献方面, 用户可检索出更多的文献数量, 通过 Scopus, 用户可以检索到 1966 年以来的 3000 多万条摘要和题录信息, 以及 1996 年以来所引用的参考文献。数据每日更新。