

第二过渡金属双核物的从头算研究 II:四羟基桥联双核物的化学键

林梦海,张乾二

厦门大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用从头计算方法讨论第二过渡金属 $M_2(O_2CR)_4L_2$ 体系的电子结构(采用有效核芯势价基),计算结果表明,金属原子 $M-M$ 间除了定域的 σ,π 键以外,还有一个离域的大 π 键,大 π 键由金属与配体四羟基组成,这种电子结构较好地解释了多年来波谱实验提出的疑问。

关键词 [羟基](#) [钼络合物](#) [化学键](#) [电子结构](#) [从头算法](#) [过渡金属络合物](#) [双核络合物](#) [桥环化合物](#) [钌络合物](#)

分类号 [0641](#)

The studies on dinuclear compounds of the second transition series II. the chemical bond of dinuclear compounds with tetracarboxylic bridges

LIN MENGHAI,ZHANG QIANER

Abstract Calculation by the ab initio effective core potentials method on the $M_2(O_2CR)_4L_2$ species ($M = Mo, Tc, Ru, Rh$) was performed and the electronic structure of these mols. is discussed. There are not only localized s, p bonds, but also delocalized bonds between metals in these mols. The delocalized bonds consist of two metal atoms and four carboxyl ligands.a

Key words [HYDROXY GROUP](#) [MOLYBDENUM COMPLEX](#) [CHEMICAL BONDS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [TRANSITION METAL COMPLEX](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [BRIDGE COMPOUNDS](#) [RUTHENIUM COMPLEX](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“羟基”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
 - [林梦海](#)
 - [张乾二](#)