

硼烷分子中化学键性质的研究 II. B<sub>3</sub>H<sub>7</sub>中四中心键及B<sub>3</sub>H<sub>9</sub>中三个隔离的氢桥三中心键

武海顺,潘道皓,周伟良,刘元隆

山西师范大学化学系;华东师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用Dunning基进行从头计算的结果表明:在B<sub>3</sub>H<sub>7</sub>(1103)中氢桥三中心键与BBB三中心键间已用 $\sigma$ -共轭效应"融合"为一个四中心键,其特征为fB(1)-B(2)=0.1653, fB(2)-B(3)=0.1429, fB-Hb-B=0.3416, f4center=0.7193hartree/bohr。但在H<sub>3</sub>H<sub>9</sub>中三个氢桥三中心键间不相互作用,保持相互独立,其特性为fB-B=0.0558, fB-Hb-B=0.3922, fHb3cen.=0.5115hartree/bohr。

**关键词** [化学键](#) [从头计算法](#) [硼烷](#) [山西省自然科学基金](#) [共轭效应](#)

分类号 [0641](#)

**Studies on the nature of chemical bonds in boranes II. The four- center bond in B<sub>3</sub>H<sub>7</sub> and the three separated hydrogen bridged three- center bond in B<sub>3</sub>H<sub>9</sub>**

WU HAISHUN,PAN DAOAI,ZHOU WEILIANG,LIU YUANLONG

**Abstract** As a result of 'ab initio' study, using Dunning's basis set, it is shown that, in B<sub>3</sub>H<sub>7</sub>(1103), the two three-center bonds have been fused into a four-center bond, owing to the  $\sigma$ -conjugation effect. The properties in bond strength of this four-center bond are: No  $\sigma$ -conjugation effect can take place between the three separated three-centerbonds in B<sub>3</sub>H<sub>9</sub>, whose properties are: hartree/bohr.

**Key words** [CHEMICAL BONDS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [BORANE](#) [CONJUGATIVE EFFECT](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(448KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“化学键”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [武海顺](#)
- [潘道皓](#)
- [周伟良](#)
- [刘元隆](#)