

## 文献综述

# 锕系化合物多重化学键的理论研究

胡憾石; 吴国是; 李隽

清华大学 化学系 理论与计算化学实验室, 北京 100084

收稿日期 2009-4-10 修回日期 网络版发布日期: 2009-11-10

**摘要** 本文简要总结了我国化学工作者在锕系化合物量子化学研究上的若干结果。在此基础上, 重点介绍了锕系元素多重化学键的相对论量子化学理论研究的进展, 特别是本文作者对锕系元素与主族元素间形成的双键和叁键的理论研究工作。

**关键词** [锕系元素](#); [主族元素](#); [多重键](#); [自然键轨道](#); [键级](#)

**分类号** [O641.12](#)

## Theoretical Investigations on Actinide Complexes With Multiple-Bonds

HU Han-shi; WU Guo-Shi; LI Jun

Theoretical & Computational Chemistry Laboratory, Department of Chemistry,  
Tsinghua University, Beijing 100084, China

**Abstract** In this mini-review article, we highlight the importance of theoretical actinide chemistry in developing heavy-element chemistry. The computational research efforts in China on actinide small molecules and complexes are briefly summarized. The article mainly focuses on the theoretical investigations that have been carried out by the present authors and collaborators on actinide systems with multiple chemical bonds, with special attention to the double- and triple-bonded complexes containing actinide and main-group elements.

**Key words** [actinide element](#); [main-group element](#); [multiple bonds](#); [natural bond orbital](#); [bond order](#)

DOI

通讯作者 李隽

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [\[PDF全文\]\(1337KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

#### 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ 本刊中 [包含“锕系元素; 主族元素; 多重键; 自然键轨道; 键级”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [胡憾石](#)
- [吴国是](#)
- [李隽](#)