

## 簇合物中锥形四重桥硫3d轨道成键的EHMO研究

刘春万; 王文亮; 李隽

中国科学院福建物质结构研究所, 结构化学国家重点实验室, 福州 350002; 延安大学化学系, 延安 716000; 中国科学院福建物质结构研究所

摘要:

运用EHMO方法对四个[M<sub>4</sub>S<sub>2</sub>] (M=Co, Nb) 型簇合物的电子结构进行了计算, 通过对硫原子3d轨道引入前后体系总能量、轨道能级、电荷分布和Mulliken键级等性质的比较, 发现簇合物中锥形四重桥硫原子的3d轨道参与了成键, 对稳定[M<sub>4</sub>S<sub>2</sub>]结构单元有重要的作用.

关键词: 簇合物 锥形四重桥硫原子 3d轨道 成键作用 EHMO

收稿日期 1992-07-10 修回日期 1992-12-14 网络版发布日期 1994-02-15

通讯作者: 刘春万 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 殷元骐; 李文; 汪汉卿. 簇合物Co<sub>6</sub>(μ<sub>3</sub>-E)<sub>8</sub>(CO)<sub>6</sub> (E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 151-156
2. 张华北; 田安民; 鄢国森. Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>的几何结构和垂直激发态光谱的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 142-146
3. 吴宝山; 刘启旺; 胡襄; 苏海全; 刘树堂; 金祥林. 四核钴羰基簇合物Co<sub>4</sub>(CO)<sub>8</sub>(μ-CO)<sub>2</sub>(μ<sub>4</sub>-PSR)<sub>2</sub>的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994, 10(10): 882-886
4. 李光进; 郭燮贤; 藤本俊幸; 市川胜. Pt羰基簇合物在NaY内的合成机理[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 710-715
5. 张华北; 田安民; 鄢国森. Li<sub>3</sub>Al和Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>的稳定性和垂直激发态光谱[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 481-483
6. 李光进; 杨亚书; 郭燮贤; 市川胜. 由分子筛笼内铂羰基簇合物得到的催化剂的分散度研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 549-554
7. 张华北; 梁国明; 田安民; 鄢国森. Li<sup>e</sup><sub>n</sub>元素簇合物的成键作用[J]. 物理化学学报, 1994, 10(04): 360-362
8. 王泽新; 张文霞; 刁兆玉. 广义簇合物在非均匀几率密度下的生长[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 39-44
9. 张敬来; 王连宾; 吴文鹏; 曹泽星. 线性簇合物SC<sub>2n</sub>S<sup>2-</sup> (n=1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
10. 张彩云; 武海顺. 硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(02): 118-122
11. 余秀芬; 王哲民. 氧心羧桥异三核过渡金属簇合物[Fe<sub>2</sub>MO(CH<sub>3</sub>COO)<sub>6</sub>Py<sub>3</sub>].Py(1, M=Mn; 2, M=Co; 3, M=Ni)和[Fe<sub>2</sub>MO(CCl<sub>3</sub>COO)<sub>6</sub>(THF)<sub>3</sub>](4, M=Mn; 5, M=Co; 6, M=Ni)电子光谱的研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(05): 577-581
12. 唐思清; 李慎敏; 杨忠志. 离子簇合物N<sup>+</sup><sub>2</sub>He<sub>n</sub> (n=1, 2, 3)的*ab initio*研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 801-806
13. 陈忠; 叶剑良; 蔡淑惠; 周兴旺; 万惠霖; 郑发鲲; 黄锦顺. <sup>51</sup>V NMR监测[VS<sub>4</sub>-Cu<sub>n</sub>] (n<6)簇合物自兜反应过程[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 426-430
14. 丁二润; 吴树林; 李庆山; 殷元骐. 手性金属簇合物的合成、结构表征及其反应[J]. 物理化学学报, 1999, 15(03): 241-246
15. 刘启旺; 成庆民; 刘树堂; 胡襄; 黄小荣. 一种含桥基的三钴羟基硫簇合物的合成与结构[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 283-287
16. 陆庆玮; 王一兵; 索全伶; 吴宝山; 孙杰. Fe<sub>3</sub>(CO)<sub>8</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NC)(μ<sub>3</sub>-S)<sub>2</sub>的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1996, 12(06): 532-536
17. 张英; 周家驹; 李恩惠; 韦统师; 王云普; 许志宏. 应用有机结构数据库系统研究钼簇合物的键价规律[J]. 物理化学学报, 1992, 8(01): 27-32
18. 刘光华; 黎乐民; 徐光宪; 梁珍璇. 五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(01): 64-71

扩展功能

本文信息

PDF(786KB)

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

▶ 簇合物

▶ 锥形四重桥硫原子

▶ 3d轨道

▶ 成键作用

▶ EHMO

本文作者相关文章

▶ 刘春万

▶ 王文亮

▶ 李隽