

过渡金属化合物的CNDO计算VI: NiCp<sub>2</sub>和Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup>的电子结构

王志中,沈尔忠

吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用CNDO法计算了单核金属茂络合物NiCp<sub>2</sub>和双核金属茂络合物Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup>的电子结构,根据波函数和电子密度等值图的组成分析讨论了二个化合物的成键,在Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup>和NiCp<sub>2</sub>之间进行了比较,指出了它们的化学键特征.

**关键词** [环戊二烯 P](#) [微分重叠全忽略近似](#) [能级](#) [电子结构](#) [过渡金属化合物](#) [金属茂络合物](#)  
[分子轨道理论](#) [镍络合物](#) [双核络合物](#) [夹心化合物](#)

分类号 [0641](#) [0611.662](#)

## CNDO calculations on transition metal compounds VI: The electronic structures of NiCp<sub>2</sub> and Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup>

WANG ZHIZHONG, SHEN ERZHONG

**Abstract** The electronic structures of mono- and dinuclear metallocenes NiCp<sub>2</sub> and Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup> have been calculated by means of CNDO method. The bonding in both the two compounds have been analyzed and discussed from the compns. of wave functions and d. contour maps and a comparison between NiCp<sub>2</sub> and Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup> have been carried out. The characters of chem. bonds in both NiCp<sub>2</sub> and Ni<sub>2</sub>Cp<sub>3</sub><sup>+</sup> have been indicated.

**Key words** [CYCLOPENTADIENE P](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [ENERGY LEVELS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [TRANSITION METAL COMPOUND](#) [METALLOCENES](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [NICKEL COMPLEX](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [SANDWICH COMPOUNDS](#)

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“环戊二烯 P”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [王志中](#)

· [沈尔忠](#)