

## 稀土夹心化合物的SCF-X $\alpha$ -SW研究 III.(Cp~2YbCl)~2和(Cp~2ErH)~2

闵新民

武汉工业大学新材料研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用SCF-X $\alpha$ -SW方法非相对论和相对论方案计算了稀土桥键夹心化合物(Cp~2YbCl)~2和(Cp~2ErH)~2能级、轨道等值图形,布居数等的研究表明,(Cp~2YbCl)~2和(Cp~2ErH)~2的共价键比Cp~2Yb和Cp~2YbC~2H~2

强而与Cp~3Sm和LnF~3相近.证实了三价稀土化合物共价键比二价化合物强,

桥键氢原子较小的原子半径和价轨道单位相性质,使氢桥化合物(Cp~2ErH)~2形成比氯桥化合物(Cp~2YbCl)~2

更强的共价键,非相对论和相对论计算能级结构,价轨道成分,成键图象等方面的差异,

表明了研究重稀土化合物考虑相对论效应的必要性

**关键词** [化学键](#) [电子结构](#) [金属茂络合物](#) [铽络合物](#) [环戊烯 P](#) [夹心化合物](#) [铈络合物](#) [相对论效应](#)

分类号 [0641](#)

## SCF-X $\alpha$ -SW calculations on lanthanide metallocenes.III.(Cp~2YbCl)~2 and (Cp~2ErH)~2

MIN XINMIN

**Abstract** SCF-X $\alpha$ -SW calcns. are carried out on lanthanide bridged metallocenes (Cp<sub>2</sub>YbCl)<sub>2</sub> and (Cp<sub>2</sub>ErH)<sub>2</sub>; both nonrelativistic and relativistic schemes were tried. The bonds of (Cp<sub>2</sub>YbCl)<sub>2</sub> and (Cp<sub>2</sub>ErH)<sub>2</sub> are more covalent in character than those of Cp<sub>2</sub>Yb and Cp<sub>2</sub>YbC<sub>2</sub>H<sub>2</sub> but similar to those of Cp<sub>3</sub>Sm and LnF<sub>3</sub>. Three valent Ln compounds are more covalent in character than two valent. The covalent bonding of (Cp<sub>2</sub>ErH)<sub>2</sub> with a H bridge is stronger than that of (Cp<sub>2</sub>YbCl)<sub>2</sub> with a Cl bridge. There are some obvious differences in energy level sequences, valent orbital compns. and bonding pictures between the two schemes, which reveals that the relativistic scheme is necessary to obtain reliable results for heavy lanthanide compounds

**Key words** [CHEMICAL BONDS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [METALLOCENES](#) [YTTERBIUM COMPLEX](#) [CYCLOPENTENE P](#) [SANDWICH COMPOUNDS](#) [ERBIUM 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“化学键”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [闵新民](#)