

## 镧系三氟化物的SCF-X $\alpha$ -SW研究

闵新民,沈尔忠,江元生,游效曾

吉林大学理论化学研究所;南京大学配位化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 对10个镧系元素(Ln)三氟化物进行了非相对论和相对论SCF-X $\alpha$ -SW计算,通过能级、轨道、结合能及布居数对比,讨论化学键本质:共价键中4f轨道的作用及相对论效应,结果表明,LnF<sub>3</sub>中Ln原子轨道参与成键的次序是:轻稀土d>f>p>s,而重稀土则有f>d>p>s。相对效应使Ln4f能级上移,扩大了与F2p能级的距离,减弱成键。原子序数增大,Ln4f能级下移,F2p能级距离缩小,使重稀土氟化物中成键增强,结合能计算值与实验值定性趋势一致,重稀土氟化物电离能的计算表明,相对论方案是获得定量符合所应该采用的。

**关键词** [计算方法](#) [镧系元素](#) [氟化物](#) [钽化合物](#) [钷化合物](#) [化学键](#) [铬化合物](#) [能级](#) [电离能](#) [分子轨道理论](#) [铈化合物](#) [钆化合物](#) [相对论](#) [钪化合物](#) [铽化合物](#) [镱化合物](#) [钇化合物](#) [镱化合物](#)

分类号 [0641](#) [0627](#)

## SCF-X $\alpha$ SW calculations on lanthanide trifluorides

MIN XINMIN, SHEN ERZHONG, JIANG YUANSHEG, YOU XIAOZENG

**Abstract** SCF-X $\alpha$ -SW calcns. are carried out on 10 LnF<sub>3</sub> compounds with Ln being Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, and Yb. Both of the nonrelativistic and relativistic schemes have been tried. Energy sequences, contour maps, binding energies, atomic populations, and ionization potentials are given in order to explore the chem. bonding with emphasis on the behavior of the f-orbitals and the role of relativistic effects.

**Key words** [COMPUTATIONAL METHOD](#) [LANTHANON](#) [FLUORIDE](#) [NEODYMIUM COMPOUNDS](#) [EUROPIUM COMPOUNDS](#) [CHEMICAL BONDS](#) [CHROMIUM COMPOUNDS](#) [ENERGY LEVELS](#) [IONIZATION ENERGY](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ERBIUM COMPOUNDS](#) [GADOLINIUM COMPOUND](#) [RELATIVITY THEORY](#) [HOLMIUM COMPOUNDS](#) [TERBIUM COMPOUNDS](#) [DYSPROSIUM COMPOUNDS](#) [SAMARIUM COMPOUNDS](#) [YTTERBIUM 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“计算方法” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [闵新民](#)
- [沈尔忠](#)
- [江元生](#)
- [游效曾](#)