

# 平面 $B_nCpPt$ ( $n=1-5$ ) 团簇的结构、稳定性和成键性质的密度泛函理论研究

王 丽, 岳瑞英, 朱小蕾

(南京工业大学化工学院, 材料化学工程国家重点实验室, 江苏 南京 210009)

[摘要] 采用密度泛函理论方法研究了团簇  $B_nCpPt$  ( $n=1-5$ ) 的结构、相对稳定性及势能面。  $B_nCpPt$  ( $n=1-5$ ) 的最低能量结构都是环状结构。平均成键能(BE)、成键能增量(IBE)、能量二次差分( $\Delta^2E$ )和前线轨道能隙( $E_{HOMO}-E_{LUMO}$ )的结果表明  $B_2CpPt$  团簇相对更稳定。最高占据轨道与最低未占据轨道能级差( $E_{HOMO}-E_{LUMO}$ )呈现奇偶振荡现象。基于 Mayer 键级(MBO)、适应性自然密度分割(AdNDP)和核独立化学位移(NICS(1)\_zz)分析揭示了  $B_4CpPt$  团簇的成键特征和芳香性。另外,通过势能面分析考察了  $B_4CpPt$  异构体的动力学稳定性。

[关键词] 硼碳铂团簇, 几何结构, 稳定性, 芳香性, 密度泛函理论

[中图分类号] 0613.71 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2017)04-0074-06

## Study of Structure, Stability, and Bond Nature of Planar $B_nCpPt$ ( $n=1-5$ ) Clusters Based on Density Functional Theory

Wang Li, Yue Ruiying, Zhu Xiaolei

(State Key Laboratory of Materials-Oriented Chemical Engineering, College of Chemical Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing 210009, China)

**Abstract:** The structures, relative energies, stabilities, and potential energy surfaces of  $B_nCpPt$  ( $n=1-5$ ) clusters are investigated in terms of density functional theory (DFT). The lowest-energy structures are ring structures. Based on the analyses of average atom bonding energy (BE), incremental of binding energy (IBE), second order difference of total energy ( $\Delta^2E$ ), and frontier orbital energy gaps ( $\Delta E_{gap}$ ), it is found that  $B_2CpPt$  cluster is relatively more stable.  $\Delta E_{gap}$  exhibits odd-even oscillating phenomena with cluster size. Mayer bond order, adaptive natural density partitioning (AdNDP), and nuclear independent chemical shift (NICS(1)\_zz) are used to reveal the bond nature and aromaticity of  $B_4CpPt$  cluster. The dynamic stability of  $B_4CpPt$  isomers is examined in terms of potential energy surface.

**Key words:** Boron-carbon-platinum clusters, geometrical structure, stability, aromaticity, DFT

团簇的尺寸为几埃到几百埃,它可以被认为是介于原子或分子与微观块状之间的一种中间态,团簇的研究对未来的纳米科技中的应用是非常重要的<sup>[1]</sup>。团簇具有原子、分子及块状物质所不具有的独特性质<sup>[2]</sup>。

硼是最轻的主族元素,其价电子排布为  $2s^22p^1$ ,所以容易形成  $sp^2$  杂化。因为价电子的  $sp^2$  杂化和较小的共价半径使得硼倾向于形成强的共价键<sup>[10]</sup>。由于硼的电子缺失和较大的配位数使得硼团簇的成键类型比较丰富<sup>[4]</sup>。由于硼独特的物理和化学性质及储氢方面的应用,使得它成为实验和理论领域中比较有趣的研究课题<sup>[5]</sup>。过渡金属掺杂到  $B_n$  纳米结构中可以实现储氢功能,Meng 指出硼纳米管掺杂 Ti 能实现 5.5 重量百分比的储氢容量<sup>[6]</sup>。最近几年对在纯硼团簇中掺入杂原子的研究越来越多。文献中有许多关于纳米尺寸的硼团簇的成键、结构和反应活性的研究,这些研究是研究原子演变到大块物质一种桥梁<sup>[7]</sup>。研究硼团簇从二维过渡到三维结构时的尺寸大小对理解硼团簇的生长机理非常重要<sup>[8]</sup>。最近 Chuchev 等人研

收稿日期:2016-11-30.

基金项目:国家自然科学基金(20706029、20876073、91434109)。

通讯联系人:朱小蕾,博士,教授,研究方向:分子模拟的研究工作。E-mail:xlzhu@njtech.edu.cn

究了  $C_nB_m$  ( $m=1,2$ ) 团簇的几何结构和电子结构,并且发现  $n>6$  时  $C_nB_m$  ( $m=1,2$ ) 团簇的最稳定结构是单环状结构,与小的纯碳团簇结构类似<sup>[3]</sup>. Yao 研究发现  $\text{ZrB}_7$  是  $\text{ZrB}_n$  ( $n=1-12$ ) 团簇中最稳定的团簇<sup>[9]</sup>. 铂团簇作为过渡金属团簇,可以用来减少一氧化碳、一氧化氮及烃类有机化合物等有毒气体的排放. 与其他的金属相比铂在加氢反应中需要较小的能量,所以铂团簇可以作为催化剂,用于许多的工业催化过程中,并且可以参与到很多催化反应<sup>[10]</sup>中. Li 等人研究发现  $\text{Pt}_4$  团簇的稳定结构是四面体结构,  $\text{Pt}_5$  团簇的稳定结构则为四方锥,  $\text{Pt}_6$  的稳定结构是四角双锥<sup>[11]</sup>. 鉴于团簇的研究正吸引越来越多的关注,这些理论研究可能会对今后的实验起到指导性的作用.

## 1 理论方法和计算细节

本文用随机算法和穷举搜索法自动生成  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇的最初结构,采用 B3LYP 对所有的  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇的初始结构进行结构优化. 对于非金属元素 B、C 所采用的基组是 6-311+g(d),而对于金属元素 Pt 所用基组为赝势基组 (LanL2DZ). 在  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇中当  $n$  为偶数时自旋多重度分别考虑了单重态和三重态,当  $n$  为奇数时自旋多重度分别考虑了二重态和四重态,比较对应情况下能量的大小. 通过频率分析考察了优化结构是否真实存在,并对团簇的能量进行相应的零点能校正. 最后通过耦合簇方法 (CCSD) 计算单点能,选出前 30 个最稳定的结构进行成键分析和芳香性分析. 这一系列的计算过程都是利用 Gaussian 09<sup>[12]</sup> 软件进行的.

## 2 结果与讨论

### 2.1 几何结构

在图 1 列举出了  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ) 每种团簇的前 5 个最稳定的结构,阿拉伯数字的增多表示能量逐渐增大,字母 a 到 e 表示 B 原子的数目从 1 增加到 5. 表 1 列出了在 B3LYP/6-311+G(d) 水平上经过零点能校正后的相对能量和在 CCSD(T)/6-311+G(d) 水平上的相对能量.

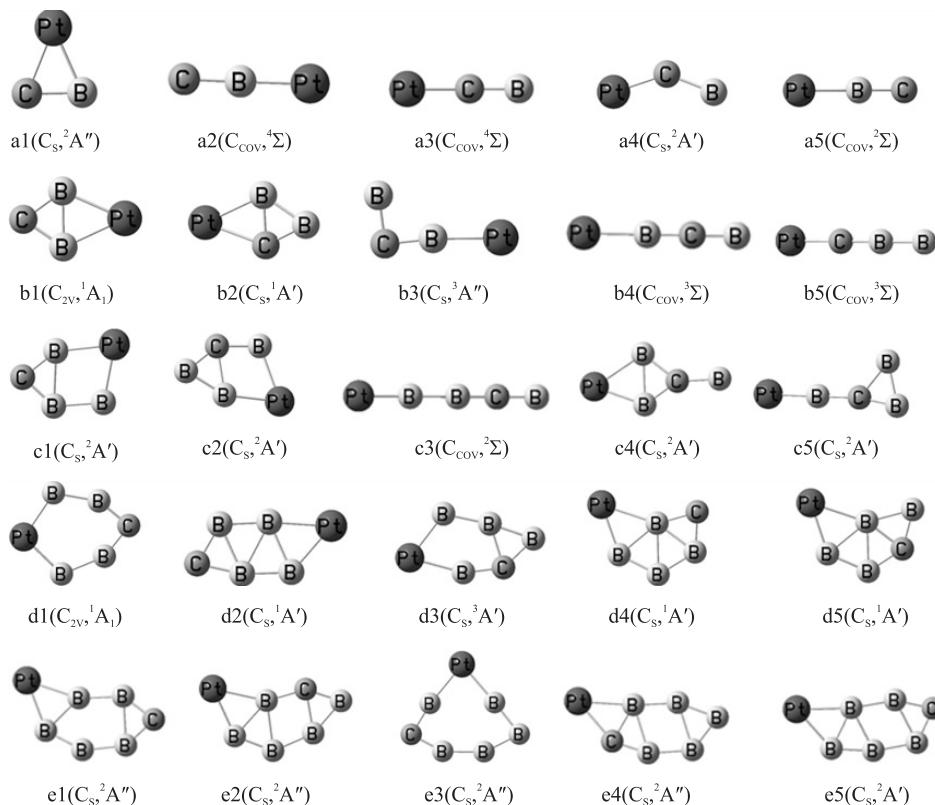


图 1 平面  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇的较低能量异构体结构图. 括号中分别为异构体的点群和电子态

Fig. 1 Optimized geometries of lower energy isomers for planar  $B_nC\text{Pt}$  ( $n=1-5$ ).

Point groups and electronic states are represented in parenthesis

BCPt 团簇:BCPt 基态是一个双重态的非对称三角形结构,其 Pt-C,Pt-B 键长分别为 1.912 Å,1.926 Å. 呈现  $C_s$  对称,电子态为 $^2A''$ . 异构体 a2,a3 都是直线型结构,将 B 与 C 的位置对换能将 a2 与 a3 结构进行相互转化. 并且 a2 与 a3 的对称性和电子态都一致,其在 CCSD/[6-311+G(d)/LanL2DZ]水平上的相对能量值要比基态 a1 分别高出 10.73 kcal·mol<sup>-1</sup>、12.63 kcal·mol<sup>-1</sup>. a4、a6 结构也类似,都是钝角三角形,a4 的 Pt-C-B 键角为 141.26°. a5 异构体与 a2 一样都是 Pt-B-C 直线形结构,只是对应的自旋多重度不一样. 可以明显看出结构相似的异构体中自旋多重度低的异构体要比自旋多重度高的异构体更加稳定.

B<sub>2</sub>CPt 团簇:最稳定的结构 b1 是四边形结构,内含 B-B 键,呈  $C_{2v}$  对称,电子态为 $^1A_1$ . 异构体 b2 可以看作是在基态 a1 的基础上添加了 1 个硼原子,也可以看作是异构体 b1 结构中的 C 与 B 原子相互交换了位置,在 CCSD(T)水平上,b2 的能量要比基态 b1 高 21.95 kcal·mol<sup>-1</sup>. 异构体 b3 和 b4 可以认为是在 a2 的不同位置添加了 1 个 B 原子得到的. 其能量在 CCSD(T)水平上要比基态 b1 分别高出 31.60 kcal·mol<sup>-1</sup>和 35.28 kcal·mol<sup>-1</sup>. 线性结构 b5 也可以看作是由 a3 添加 1 个 B 原子得到的异构体结构,其能量与异构体 b4 的能量很接近,并且它们的结构类似,b5 可以看作是由 b4 中的 C 与 B 原子互换了位置得到的.

B<sub>3</sub>CPt 团簇:前 5 个稳定结构都是双重态的异构体,基态 c1 的结构是由 1 个三元环和 1 个四元环组成,也可以看作是 1 个内部含有 C-C 键的五元环结构,呈  $C_s$  对称,电子态为 $^2A'$ . 异构体 c1 与 c2 能量相差很小,并且结构相似,对称性及电子态都相同,交换 c1 与 c2 中 B 和 C 的位置可以将其进行相互转化. 线性异构体 c3 可以看作是在 b4 中添加 1 个 B 原子,其能量在 CCSD(T)水平上要比基态高 24.52 kcal·mol<sup>-1</sup>.

B<sub>4</sub>CPt 团簇:基态 d1 为 1 个六元环结构,具有  $C_{2v}$  对称,电子态为 $^1A_1$ . 同样 d2 也是六元环结构,其内部含有 C-C 键,能量要比基态 d1 高 0.78 kcal·mol<sup>-1</sup>在 CCSD(T)水平上. d3 既是 1 个六元环结构,也可以看作是 1 个三元环与 1 个五元环共享其中 1 个 C-B 键. 其能量在 CCSD(T)水平上要比基态 d1 高出 6.76 kcal·mol<sup>-1</sup>. d4 和 d5 都是扇形结构,都含有五配位的 B 原子,交换其中 1 个 B 原子与 1 个 C 原子的位置能得到其它两个异构体,且能量相差比较小,分别比基态高出 9.05 kcal·mol<sup>-1</sup>、9.46 kcal·mol<sup>-1</sup>.

B<sub>5</sub>CPt 团簇:前 5 个较低能量异构体都是低自旋异构体,基态 e1 是 1 个七元环结构,内含 B-B 键,也可以看作是由两个三元环和 1 个五元环组成,异构体 e2 与基态 e1 结构类似,都可以认为是 3 个三元环和 1 个四元环组成的七元环结构,其中 1 个 B 原子与 C 原子的位置进行了互换,在 e1 中有 1 个三配位的 B 原子,而在 e2 中有 1 个四配位的 B 原子. e3 也是七元环结构,能量在 CCSD(T)水平上要比基态高 9.19 kcal·mol<sup>-1</sup>. e4、e5 交换其中对应的 1 个 B 原子和 1 个 C 原子能将其进行相互转化.

表 1 B<sub>n</sub>CPt(n=1~5)团簇的能量较低异构体在不同理论水平下的相对能量

Table 1 The relative energies(kcal·mol <sup>-1</sup> ) of lower-energy isomers for B <sub>n</sub> CPt( <i>n</i> =1~5) at different levels										kcal·mol <sup>-1</sup>	
异构体	Δ <i>E</i> <sup>I</sup>	Δ <i>E</i> <sup>II</sup>	异构体	Δ <i>E</i> <sup>I</sup>	Δ <i>E</i> <sup>II</sup>	异构体	Δ <i>E</i> <sup>I</sup>	Δ <i>E</i> <sup>II</sup>	异构体	Δ <i>E</i> <sup>I</sup>	Δ <i>E</i> <sup>II</sup>
a1	0.0	0.0	b8	33.0	39.80	c10	32.7	36.47	e1	0.0	0.0
a2	6.0	10.73	b9	48.2	49.02	d1	0.0	0.0	e2	9.5	8.11
a3	4.6	12.63	b10	49.3	53.10	d2	-5.1	0.78	e3	12.0	9.19
a4	17.7	20.58	c1	0.0	0.0	d3	0.0	6.76	e4	11.6	10.00
a5	18.1	24.91	c2	3.1	3.71	d4	1.9	9.05	e5	16.5	15.62
b1	0.0	0.0	c3	12.7	24.52	d5	5.7	9.46	e6	20.2	16.39
b2	23.5	21.95	c4	27.2	28.92	d6	4.2	10.15	e7	19.0	17.73
b3	26.2	31.60	c5	25.0	31.09	d7	13.0	11.40	e8	14.7	18.65
b4	24.3	35.28	c6	34.7	32.46	d8	9.2	11.75	e9	18.5	18.83
b5	64.3	36.49	c7	33.9	34.38	d9	13.2	12.06	e10	20.2	19.08
b6	47.8	37.73	c8	28.3	35.98	d10	5.2	12.30	e2	9.5	8.11
b7	34.1	37.78	c9	33.2	36.40						

注:<sup>I</sup>在 B3LYP/6-311+G(d)水平上零点能校正后的相对能量;<sup>II</sup>在 CCSD(T)/6-311+G(d)//B3LYP/6-311+G(d)水平上的相对能量.

2.2 相对稳定性

为了考察 B<sub>n</sub>CPt(n=1~5)团簇的相对稳定性,我们分析了对平均成键能(BE)、成键能增量(IBE)、能量二次差分(Δ<sup>2</sup>E)、最高占据轨道与最低未占轨道能隙(HOMO-LUMO gap). 从图 2(a)可以看出,平均成键能增量(BE)随着 n 的增大呈现增大的趋势,当 n≥2 时能量增加比较平缓. 如图 2(b)和(c)所示,随着 B 原子数的增加,成键能增量和能量二次差分都呈现一个下降趋势. 由图 2(a)、(b)和(c)可以看出,

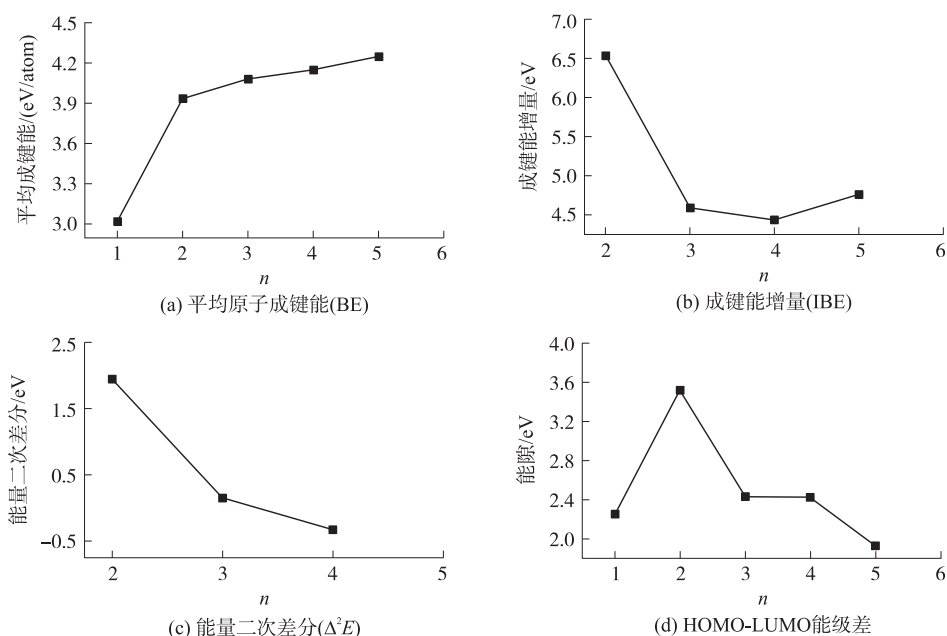


图2  $B_nCpPt$  ( $n=1-5$ ) 团簇最稳定异构体的平均原子成键能(BE) (a)、成键能增量(IBE) (b)、能量二次差分( $\Delta^2E$ ) (c)、HOMO-LUMO 能级差(d)与B原子数的关系

Fig. 2 The binding energy per atom(BE) (a), incremental binding energy(IBE) (b), second order difference( $\Delta^2E$ ) (c), the HOMO-LUMO gap(d) versus  $n$  for the most stable isomers of  $B_nCpPt$  ( $n=1-5$ )

$B_2CpPt$  团簇具有相对较高的稳定性. 图 2(d) 是最高占据轨道与最低未占据轨道能隙随 B 原子数目变化的关系图, 该图呈现出奇偶振荡现象,  $n$  为偶数时要比相邻  $n$  为奇数时的团簇的能隙要大, 说明  $n$  为偶数对应的团簇要比相邻  $n$  为奇数对应的团簇稳定. 图(d)的结果说明  $B_2CpPt$  团簇比较稳定.

### 2.3 异构化

图 3 是单重态  $B_4CpPt$  在 B3LYP/CCSD 水平上的势能面图. d1 ( $d1 \rightarrow d2$ )、d2 ( $d2 \rightarrow d1$ )、d5 ( $d5 \rightarrow d2$ )、d7 ( $d7 \rightarrow d1$ )、d9 ( $d9 \rightarrow d4$ )、d16 ( $d16 \rightarrow d8$ )、d22 ( $d22 \rightarrow d4$ ) 的最小能垒值分别是  $17.51 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $16.73 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $14.79 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $10.43 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $14.58 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $10.24 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $15.83 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 具有较

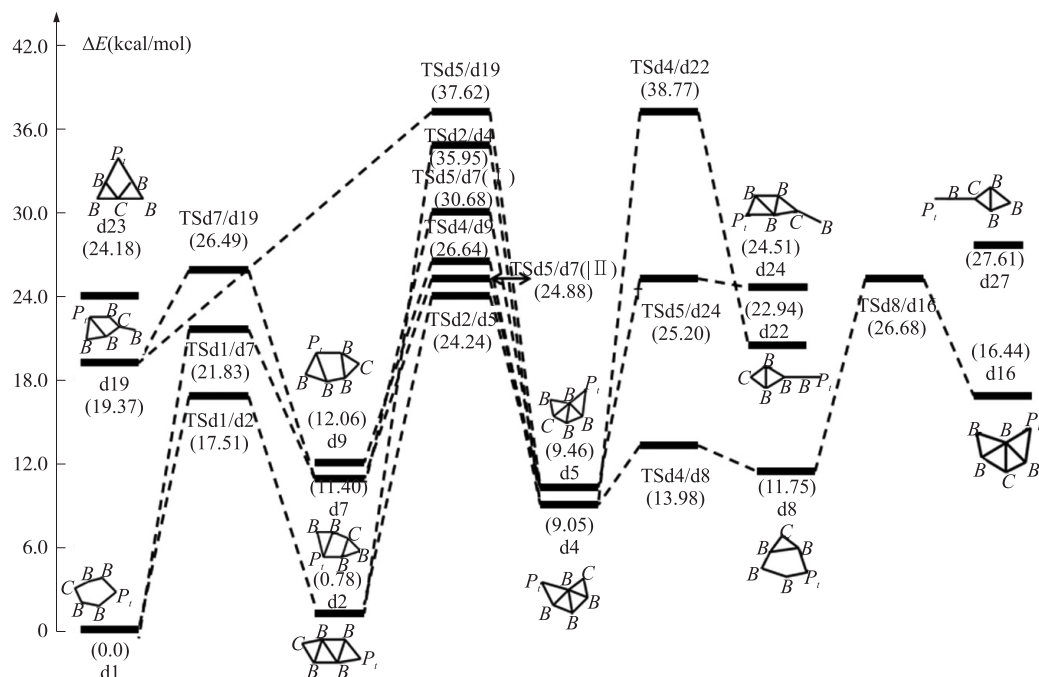


图3 在 CCSD(T)/6-311+G(d)//B3LYP/6-311+G(d) 水平上单重态  $B_4CpPt$  的势能面图

Fig. 3 Schematic potential energy surface of singlet  $B_4CpPt$  at the CCSD(T)/6-311+G(d)//B3LYP/6-311+G(d) level



高的动力学稳定性. 而  $d4(d4 \rightarrow d8)$ 、 $d8(d8 \rightarrow d4)$ 、 $d19(d19 \rightarrow d7)$ 、 $d24(d24 \rightarrow d5)$  的最小异构化能垒分别为  $4.94 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $2.24 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $7.12 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 $0.70 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 说明异构体  $d4$ 、 $d8$ 、 $d19$ 、 $d24$  在动力学上是不稳定的. 异构体  $d23$ 、 $d27$  没有找到对应的过渡态. 基态  $d1$  通过过渡态  $\text{TSd1}/d2$  转化为异构体  $d2$  (六元环结构), 此过程要形成 3 个 B-B 键. 同理, 基态异构体  $d1$  可以通过过渡态  $\text{TSd1}/d7$  转变为异构体  $d7$  (六元环结构), 此过程要形成 1 个 B-B 键和 1 个 B-Pt 键. 异构体  $d2$ 、 $d5$  可以相互转化,  $d2$  转化为  $d5$  需断开 B-B 键和形成 B-C 键,  $d2 \rightarrow \text{TSd2}/d4$  (五元环和一支链) 需要克服的能垒为  $34.17 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $d4 \rightarrow \text{TSd2}/d4$  需要克服的能垒为  $28.90 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ .  $d7$  可以经过两个直接的异构化途径转化为  $d5$ , 所需要克服的能垒分别为  $13.48 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$  和  $19.28 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 此过程需要断开 1 个 B-Pt 键并形成两个 B-B 键.  $d8 \rightarrow \text{TSd2}/d4$  的转化能垒很小, 为  $2.23 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 这可能是由于异构体  $d8$  与过渡态  $\text{TSd2}/d4$  的结构相似 (六元环结构),  $d8 \rightarrow d4$  需要断裂两个 B-B 键.  $d8$  也可以通过形成 1 个 B-B 键和 1 个 B-C 键转化为  $d16$  (六元环结构), 所需要克服的能垒值为  $14.93 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

## 2.4 成键特征与芳香性

AdNDP 可以用来分析团簇的芳香性和成键特性<sup>[13]</sup>, AdNDP 只适用于闭壳型的团簇, 从图 4 可以发现  $B_4\text{CPt}$  基态  $d1$  有 1 个孤电子对, 6 个  $2c-2e$   $\sigma$  键, 两个  $2c-2e$   $\pi$  键, 两个  $4c-2e$   $\sigma$  键, 1 个  $5c-2e$   $\pi$  键, 1 个  $5c-2e$   $\sigma$  键. 总共有两个离域的  $\pi$  电子, 6 个离域的  $\sigma$  电子, 都符合休克尔 ( $4n+2$ ) 规则, 所以异构体  $d1$  既有  $\sigma$  芳香性又具有  $\pi$  芳香性. 核独立化学位移 (NICS) 的计算是利用 GIAO-B3LYP/[6-311+G(d)/LanL2DZ] 方法计算的. NICS(1)<sub>zz</sub> 是指在异构体环平面的上方 1 Å 处垂直于环平面方向的屏蔽张量分量值. 若 NICS(1)<sub>zz</sub> 为负值则具有芳香性, 相反则有反芳香性. 异构体  $d1$  的 NICS(1)<sub>zz</sub> 为  $-20.3084$ , 所以异构体  $d1$  具有较强的芳香性. Mayer 键级 (MBO) 的计算是在 B3LYP/[6-311+G(d)/LanL2dz] 水平上进行的. 异构体  $d1$  的 C-B、B-B、B-Pt 键级分别为 1.49、1.16、1.71, 这与异构体  $d1$  的 B-B 的定域电子分布要比 C-B、B-Pt 的定域电子分布要长并且要窄相符合,  $d1$  的 B-B-C 键级为 0.347, 其值要大于 0.3<sup>[14]</sup>, 说明  $d1$  具有较强的三中心键相互作用.

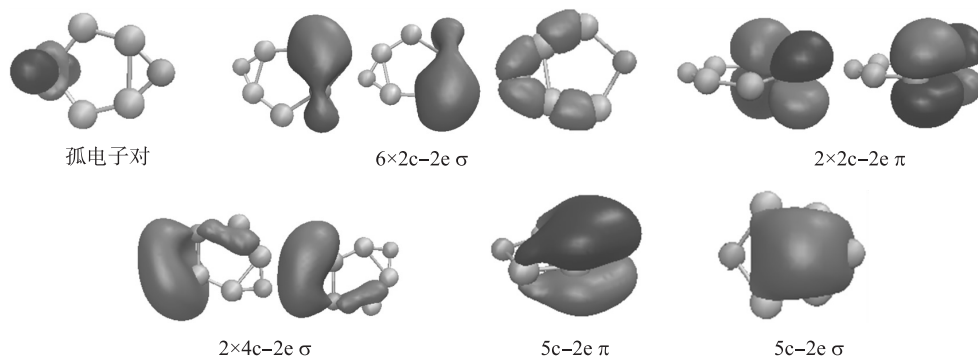


图4 平面  $B_4\text{CPt}$  基态团簇异构体的 AdNDP 定域图

Fig. 4 Adaptive natural density partitioning for the ground state( $d1$ ) of planar  $B_4\text{CPt}$

## 3 结语

$B_n\text{CPt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇的稳定结构几乎都是平面结构, 并且大部分为多元环结构. 通过对  $B_n\text{CPt}$  ( $n=1-5$ ) 团簇的平均成键能、成键能增量及能量二次差分、能隙的研究可以判断  $B_2\text{CPt}$  具有相对较高的稳定性. 单重态  $B_4\text{CPt}$  异构体中  $d1$ 、 $d2$ 、 $d5$ 、 $d7$ 、 $d9$ 、 $d16$ 、 $d22$  具有较大的动力学稳定性. 通过成键分析及芳香性分析可知异构体  $d1$  具有双芳香性和较强的三中心键相互作用.

## [参考文献]

- [1] BÖYÜKATA M, GÜVENÇ B. Density functional study of  $\text{AlB}_n$  clusters for  $n=1-14$  [J]. Journal of alloys and compounds, 2011, 509:4 214-4 234.
- [2] KODLAA A, EL-TAHER S. A DFT study on the structures and stabilities of As-doped  $\text{Si}_{n-1}$  ( $n=2-15$ ) clusters [J]. Computa-

- tional and theoretical chemistry, 2012, 992: 134–141.
- [3] 王若曦,张冬菊,朱荣秀,等. 硼碳团簇  $B_nC_2(n=1\sim6)$  的理论研究[J]. 化学学报, 2007, 65: 2 092–2 096.
- [4] CHENG L. B14: an all-boron fullerene[J]. The journal of chemical physics, 2012, 136: 1–4.
- [5] GU J, WANG C, CHENG Y, et al. Probing the structural and electronic properties of boron cluster anions doped with one or two aluminum atoms[J]. Computational and theoretical chemistry, 2014, 1 049: 67–74.
- [6] JIA J, MA L, WANG J F, et al. Structures and stabilities of  $ScB_n(n=1-12)$  clusters: an ab initio investigation[J]. Journal of molecular modeling, 2013, 19: 3 255–3 261.
- [7] BÖYÜKATA M, GÜVENÇİZ B. DFT study of Al doped cage  $B_{12}H_n$  clusters International[J]. Journal of hydrogen energy, 2011, 36: 8 392–8 402.
- [8] TAI T B, TAM N M, NGUYEN M T. Structure of boron clusters revisited,  $B_n$  with  $n=14-20$ [J]. Chemical physics letters, 2012, 530: 71–76.
- [9] JIA J, LI X, LI Y, et al. Density functional theory investigation on the structure and stability of  $Sc_2B_n(n=1-10)$  clusters[J]. Computational and theoretical chemistry, 2014, 1 027: 128–134.
- [10] SINGH N B, SARKAR U. Structure, vibrational, and optical properties of platinum cluster: a density functional theory approach[J]. Journal of molecular modeling, 2014, 20(2 537): 1–11.
- [11] 温俊青,周红,张陈俊,等.  $Pt_n(n=1-9)$  团簇结构及磁性的第一性原理计算[J]. 计算物理, 2013, 30(4): 596–604.
- [12] FRISCH M, TRUCKS G, SCHLEGEL H, et al. gaussian 09[M]. Wallingford: Gaussian Inc, 2009.
- [13] SERGEEVA A P, POPOV I A, PIAZZA Z A, et al. Understanding boron through size-selected clusters: structure, chemical bonding, and fluxionality[J]. Accounts of chemical research, 2014, 47: 1 349–1 458.
- [14] KAR T, SCHEINER S. Three-center bond index profiles[J]. Journal of molecular structure: theochem, 1996, 370: 45–49.

[责任编辑:顾晓天]