

反常蓝移单电子锂键Y...Li-CH<sub>3</sub>[Y=CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>]体系的结构与性质

李志锋, 朱元成, 左国防, 唐慧安, 李红玉

天水师范学院生命科学与化学学院化学系, 甘肃 天水 741001

摘要:

在密度泛函理论的B3LYP/6-311++G(d,p)及MP2/6-311++G(d,p)水平上研究了单电子锂键复合物Y...Li-CH<sub>3</sub>[Y=CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>]的结构与性质. 结果表明, 三种单电子锂键复合物H<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>C...Li-CH<sub>3</sub>(II), (H<sub>3</sub>C)<sub>2</sub>HC...Li-CH<sub>3</sub>(III)和(H<sub>3</sub>C)<sub>3</sub>C...Li-CH<sub>3</sub>(IV)单电子锂键键强(1) < III (-30.2 kJ·mol<sup>-1</sup>) < IV (-32.8 kJ·mol<sup>-1</sup>)的顺序递增, 相对于单体Li-CH<sub>3</sub>, 复合物II, III及IV中Li-CH<sub>3</sub>键虽然拉长, 但其伸缩振动频率出现了反常的蓝移, 且蓝移程度依次增大, 分别为15.1, 18.9和20.5 cm<sup>-1</sup>. 供电子体中甲基数目的递增, 加强了这种单电子弱键作用, 而若电子受体LiH中H键相互作用. 利用自然键轨道(NBO)及分子中原子(AIM)分析进一步对体系的弱键相互作用进行了探讨.

关键词: 单电子锂键 单电子氢键 单电子卤键 NBO AIM

收稿日期 2009-08-11 修回日期 2009-09-14 网络版发布日期 2009-11-18

通讯作者: 李志锋 Email: zflitsnu@163.com

本刊中的类似文章