

有机锂化合物中化学键的性质---反式1,2-二锂代乙烷、1,2-二锂代乙烯和1,2-二锂代乙炔分子中化学键的abinitio研究

钮泽富,刘元隆,潘道皓

华东师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用从头计算法计算了电荷密度图和各分子轨道的键强参数.结果表明,三个标题化合物的稳定构型都存在双桥式四中心键.追其原因是:这种构型有利于Li的2p轨道的吸电子效应,这种效应可使C-Li键增强.此外,也发现这三个化合物中C-C键的强度大于C=C键,而后者又比C=C键为强,本文亦讨论了这种"反常"的原因.

关键词 [乙炔 P](#) [化学键](#) [从头计算法](#) [分子轨道理论](#) [乙炔 P](#) [构型](#) [乙烷 P](#) [电荷密度](#) [有机锂化合物](#)

分类号 [0621.16](#)

The nature of chemical bonds in organolithium compounds--an ab initio study on the chemical bonding in the trans-forms of 1,2-dilithioethane 1, 2-dilithioethylene and 1,2-dilithioacetylene

NIU ZEFU,LIU YUANLONG,PAN DAOAI

Abstract On the basis of ab initio calcs. by means of electron d. contour maps and BSP's of individual valence MO's, it is found that all the stable configurations of the three title compounds have a double bridge 4-center bond. The reason for that is such a configuration is in favor of the electron drawing effect of the Li 2p-orbitals, which may strengthen the C-Li bonds. Within these 3 compounds C-C is stronger than C=C, the latter is stronger than CYC. This seems to be somewhat abnormal. The reason of such an abnormality has been discussed.

Key words [ETHYLENE P](#) [CHEMICAL BONDS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ACETYLENE P](#) [CONFIGURATION](#) [ETHANE P](#) [CHARGE DENSITY](#) [ORGANO LITHIUM 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“乙炔 P”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [钮泽富](#)
- [刘元隆](#)
- [潘道皓](#)