

## 硫叶立德化合物优势构型和键结构的量子拓扑研究

曾艳丽,郑世钧,孟令鹏

河北师范大学化学学院计算量子化学研究所,石家庄(050091)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 采用MP4 (SDTQ) /6-311++G (d,p) 和B3LYP/6-311++G (d,p) 对所选四种化合物进行构型优化,从量子拓扑学的角度对各稳定构型进行电子密度拓扑分析,讨论了C-S键的特性。研究发现: (1) 类硫叶立德自由基 ( $\cdot\text{CHSH}_2$ ) 和硫叶立德 ( $\text{CH}_2\text{SH}_2$ ) 基态的稳定构型都不具有 $C_s$ 对称性; (2) 类硫叶立德自由基和硫叶立德中C-S键的性质类似,硫叶立德中 $\pi$ 键由两个电子形成,类硫叶立德自由基中 $\pi$ 键由一个电子形成,所以前者的 $\pi$ 键性质明显,后者的 $\pi$ 键性质不明显; (3) 类硫叶立德自由基 ( $\cdot\text{CHSH}_2$ ) 中单电子 $\pi$ 键中的电子主要在碳原子附近运动,属于单电子 $\pi$  (C  $\rightarrow$  S) 配键,所以其C-S键的强度比相应的产物要弱。

**关键词** [硫叶立德](#) [拓扑](#) [化学键](#) [电子密度](#) [构型](#)

分类号 [0641](#)

## Topological Studies on the C-S Bond of S-Ylide Compounds

Zeng Yanli,Zheng Shijun,Meng Lingpeng

Institute of Quantum Chemistry at College of Chemistry, Hebei Normal University,Shijiazhuang(050091)

**Abstract** MP4(SDTQ)/6-311++G(d,p) and B3LYP/6-311++G(d,p) calculations were carried out to optimize the structures of S-ylide compounds. The C-S bond characters were discussed by topological analysis of the electronic density. The following conclusions are drawn: (1) Neither the S-ylide nor the S-ylide-like radical has  $C_s$  symmetry. (2) The C-S bond character of S-ylide-like radical is similar to that of S-ylide, there exist  $\pi$  bonds in both types of ylide compounds. However, there are two electrons in the  $\pi$  bond of S-ylide, while there is only one electron in the  $\pi$  bond of S-ylide-like radical. (3) The electron in the  $\pi$  bond of S-ylide-like radical appears mainly near the C atom. It has  $\pi$ (C  $\rightarrow$  S) bond character, therefore it is weaker than the C-S bond in the corresponding product.

**Key words** [S-ylide](#) [TOPOLOGY](#) [CHEMICAL BONDS](#) [ELECTRON DENSITY](#) [CONFIGURATION](#)

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“硫叶立德”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [曾艳丽](#)

· [郑世钧](#)

· [孟令鹏](#)