

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT HÓA HỌC LƯỢNG TỬ LIÊN KẾT HIĐRÔ CHUYỂN DỜI XANH CỦA PHỨC GIỮA CHCl_3 VÀ CDCl_3 VỚI SO_2 TRONG PHA KHÍ

Đến Tòa soạn 05-01-2007

NGUYỄN TIẾN TRUNG¹, TRẦN THÀNH HUẾ², NGUYỄN MINH THỌ³

¹Khoa Hóa học, Đại học Quy Nhơn

²Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

³Khoa Hóa học, Đại học Leuven, Vương Quốc Bỉ

SUMMARY

The $\text{CH(D)Cl}_3\text{-OSO}$ complexes geometries are studied by high level quantum chemical calculation, MP2/6-31++G(2d,2p). The interaction energies are corrected with ZPE and BSSE. Four complexes are obtained, in which three complexes have point group, C_s , with binding energy about 2.18 - 2.20 kcal.mol⁻¹ and the last has point group C_1 with energy about 2.16 - 2.17 kcal.mol⁻¹. In all complexes, there is a contraction of the C-H(D) bond, a shift to higher frequency called "blue-shift" of the C-H(D) stretching frequency compared to the CH(D)Cl_3 monomes. However, there is an apparent increase of the IR intensity. The blue-shifts are 8.4, 5.9 cm⁻¹ in the $\text{CHCl}_3\text{...OSO}$ (C_1) and $\text{CDCl}_3\text{...OSO}$ (C_1), in good agreement with the experimental results 7 cm⁻¹, 5 cm⁻¹, respectively. The NBO analysis indicates that the H-index is not reason for physical origin of blue-shifting hydrogen bond but the EDT is also reason for the contraction.

I - GIỚI THIỆU

Liên kết hiđrô là đặc biệt quan trọng đối với những tương tác yếu trong các hệ sinh học và hóa học [3, 5, 7]. Vì vậy, đã có nhiều nghiên cứu về thực nghiệm và lý thuyết được thực hiện. Gần đây một kiểu mới được gọi là liên kết hiđrô chuyển dời xanh (blue-shifting) gắn với sự rút ngắn liên kết và một sự chuyển dời xanh của tần số dao động hóa trị tương ứng đã được phát hiện. Tuy nhiên bản chất thực sự của loại liên kết này chưa được hiểu một cách có hệ thống. Cả hai phân tử CHCl_3 và SO_2 là những dung môi quan trọng. Vì vậy sự tương tác giữa chúng đã được nghiên cứu bằng lý thuyết [4] và thực nghiệm [5]. Tuy nhiên, Michael Hipple [4] chưa thể lý giải chính xác kết quả thu được từ thực nghiệm bằng lý thuyết với MP2/6-311++G(d,p). Vì vậy trong bài báo này chúng tôi sử dụng

những tính toán hóa học lượng tử mức độ cao hơn để giải thích rõ hơn kết quả từ thực nghiệm của của công trình [5], đồng thời cũng tiếp tục nghiên cứu sâu hơn về bản chất thực sự của liên kết hiđrô chuyển dời xanh mà chúng tôi đã trình bày trong bài báo [6].

II - PHƯƠNG PHÁP TÍNH

Hình học của các monome và phức được tối ưu ở mức lý thuyết cao MP2/6-31++G(2d,2p). Năng lượng tương tác được hiệu chỉnh ZPE và BSSE. Điện tích trên nguyên tử, mật độ electron trên obitan phân tử, hệ số obitan lai hóa được tính dựa vào mô hình sự chiếm obitan liên kết thuần túy NBO (natural bond orbital). Hình học topo của những điểm tới hạn liên kết (BCPs: bond critical points) được tính theo thuyết AIM (atoms in molecule). Năng lượng tương tác siêu

liên hợp được tính theo lý thuyết nhiễu loạn bậc hai. Tần số dao động hóa trị và năng lượng dao động điểm không được hiệu chỉnh với hệ số 0,95. Tất cả các thông số trên đều được tính bằng phần mềm Gaussian 2003.

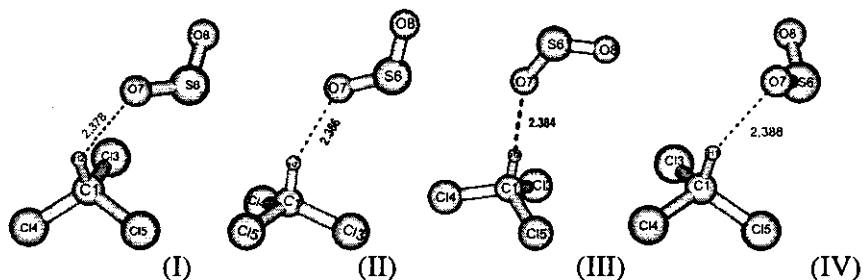
III - KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

1. Cấu trúc phân tử, tần số dao động hóa trị, năng lượng tương tác

Kết quả tối ưu hình học thu được 4 phức trên

bề mặt thế năng, trong đó 3 phức thuộc nhóm điểm đối xứng C_s (I, II, III) và một phức thuộc nhóm điểm C_1 (IV) như được chỉ ra ở hình 1.

Do CH(D)Cl_3 thuộc nhóm điểm đối xứng C_{3v} nên SO_2 có thể quay tự do xung quanh và tạo ra 3 phức I, II, III tương tự nhau, khoảng cách $\text{CH(D)}\dots\text{O}$ vào cỡ 2,38 Å, ngắn hơn so với kết quả 2,41 Å của M. Hippler [5]. Vì vậy từ đây chúng tôi chỉ lấy hình học của phức I(C_s) và IV(C_1) làm đại diện để phân tích. Thông số đặc trưng của monome và phức được đưa ra trong bảng 1.



Hình 1: Cấu trúc hình học của phức CH(D)Cl_3 và SO_2

Bảng 1: Sự thay đổi độ dài liên kết, góc, tần số, cường độ hồng ngoại và năng lượng tương tác được tính theo mức lý thuyết MP2/6-31++G(2d,2p)

	Monome			Phức			
	SO_2	CHCl_3	CDCl_3	CHCl_3 và SO_2		CDCl_3 và SO_2	
				Phức IV (C_1)	Phức I (C_s)	Phức IV (C_1)	Phức I (C_s)
$r(\text{C-H,D})$		1,08157	1,08157	-0,00012	-0,00072	-0,00012	-0,00072
$r(\text{C-Cl3})$		1,77706	1,77706	0,00478	0,00311	0,00478	0,00311
$r(\text{C-Cl4})$		1,77706	1,77706	-0,00322	-0,00274	-0,00322	-0,00274
$r(\text{C-Cl5})$		1,77706	1,77706	0,00172	0,00311	0,00172	0,00311
$R(\text{S-O7})$	1,4682			0,00220	0,00261	0,00220	0,00261
$R(\text{S-O8})$	1,4682			-0,00095	-0,00050	-0,00095	-0,00050
$A(\text{ClH(D)O7})$				127,9	129,6	127,9	129,6
$A(\text{SOS})$	119,6			119,1	118,9	119,1	118,9
H2O7				2,388	2,378	2,3878	2,3813
ν		3057,40	2251,30	3065,84	3074,00	2257,20	2263,16
$\Delta\nu$				8,4	16,6	5,9	11,86
I		1,5	0,3	8,6	13,2	3,0	4,8
ΔE_0				-3,18	-3,62	-3,59	3,63
ΔE_0^{BSSE}				-2,16	-2,18	-2,17	-2,20

Độ dài liên kết tính theo đơn vị Å, góc A theo độ, tần số ν theo cm^{-1} , cường độ hồng ngoại I theo km.mol^{-1} , năng lượng theo kcal.mol^{-1} , năng lượng được hiệu chỉnh ZPE (ΔE_0) và BSSE (ΔE_0^{BSSE}).

Giá trị năng lượng thu được cho thấy phức I(C₁) bền hơn phức IV(C₁) khoảng 0,44 kcal.mol⁻¹ (chưa hiệu chỉnh BSSE) và 0,02 kcal.mol⁻¹ (hiệu chỉnh BSSE) đối với phức CHCl₃...OSO và 0,04 kcal.mol⁻¹ (chưa hiệu chỉnh BSSE), 0,03 kcal.mol⁻¹ (hiệu chỉnh BSSE) đối với phức CDCl₃...OSO. Năng lượng tương tác thu được trong bảng 1 âm hơn so với giá trị mà bài báo [4] đã đưa ra với mức lý thuyết MP2/6-311++G(d,p). Nguyên nhân có thể do chúng tôi đã sử dụng bộ hàm cơ sở 6-31++G(2d,2p), có thêm yếu tố phân cực d, p cho nguyên tử của nguyên tố nặng.

Kết quả bảng 1 cho thấy, liên kết C-H(D) đã bị rút ngắn, rút ngắn nhiều hơn ở phức I, ít hơn ở phức IV. Vậy đây là loại liên kết hiđrô chuyển dời xanh. Theo Hermansson, đặc trưng liên kết hiđrô chuyển dời đỏ không chỉ do sự kéo dài của liên kết X-H và sự giảm tần số dao động hóa trị mà còn gắn liền với sự gia tăng cường độ hồng ngoại. Trái lại, đối với liên kết hiđrô chuyển dời xanh thì liên kết X-H bị rút ngắn, gia tăng tần số dao động hóa trị, giảm cường độ hồng ngoại. Kết quả thu được ở bảng 1 không phải như vậy. Trong những phức chuyển dời xanh, mặc dù tần số dao động hóa trị tăng nhưng cường độ hồng ngoại I không giảm. Để thảo luận kết quả này, trước hết ta theo giả thuyết của Hermansson. Ông đã đưa ra công thức tính sự thay đổi tần số dao động hóa trị như sau:

$$\Delta\nu \propto -F_{\parallel} \left(d\mu^0/dr_{XH} + (1/2)d\mu^{ind}/dr_{XH} \right) \quad (1),$$

trong đó: $F_{\parallel}$ là trường điện dọc theo liên kết X-H, xấp xỉ trường của phân tử nhận proton; $\Delta\nu$ là khoảng chuyển dời của tần số dao động hóa trị X-H; $d\mu^0/dr_{XH}$ là đạo hàm mômen lưỡng cực theo tọa độ X-H của phân tử cho proton và $d\mu^{ind}/dr_{XH}$ là đạo hàm mômen lưỡng cực của monome do sự hình thành phức theo tọa độ X-H. Hermansson kết luận rằng $d\mu^{ind}/dr_{XH}$ luôn dương nên khi $d\mu^0/dr_{XH} > 0$, liên kết hiđrô là chuyển dời đỏ và nếu $d\mu^0/dr_{XH} < 0$, cả hai liên kết hiđrô chuyển dời xanh và đỏ được hình thành, phụ thuộc vào độ lớn của $d\mu^{ind}/dr_{XH}$. Từ đó, ông đưa ra biểu thức tính cường độ phổ hồng ngoại:

$$I \propto |d\mu/dr_{XH}|^2 = |d\mu^0/dr_{XH} + d\mu^{ind}/dr_{XH}|^2 \quad (2)$$

Như vậy, mọi chuyển dời đỏ đều làm tăng cường độ hồng ngoại I và khi chuyển dời xanh thì I giảm. Chúng tôi lấy hình dạng cân bằng của monome trong phức, thay đổi độ dài liên kết C-H từ -0,05 Å đến +0,05 Å với khoảng thay đổi là 0,01 Å để tính momen lưỡng cực của CHCl₃, kết quả thu được như ở phương trình (3).

$$\Delta\nu = 0,3115\Delta r(C-H) - 0,0008 \quad (R^2 = 0,9925) \quad (3)$$

Từ phương trình (3), thấy rằng giữa biến thiên mômen lưỡng cực và biến thiên độ dài liên kết C-H là đồng biến nghĩa là $d\mu^{ind}/dr_{XH} > 0$, mặc khác $d\mu^0/dr_{XH} > 0$; tuy nhiên CHCl₃ vẫn cho liên kết hiđrô chuyển dời xanh, trái với thuyết của Hermansson. Vậy có thể kết luận rằng đạo hàm mômen lưỡng cực của phân tử cho proton theo tọa độ X-H với giá trị dương vẫn có thể hình thành phức có liên kết hiđrô chuyển dời xanh. Từ phương trình (2), vì $d\mu^0/dr_{XH} > 0$ nên cường độ hồng ngoại sẽ tăng khi hình thành phức, đúng như số liệu ở bảng 1. Hơn nữa, khi hình thành phức, yếu tố đối xứng của CHCl₃ giảm nên cường độ hồng ngoại sẽ tăng. Kết luận của Hermansson không đúng vì công thức (1) chỉ kể tới tương tác tĩnh điện, tương tác đẩy trao đổi electron trong khoảng cách gần giữa các monome đã không được kể đến. Giá trị ν , $\Delta\nu$ của dao động hóa trị C-H(D) ở bảng 1 phù hợp rất tốt với giá trị đo được từ thực nghiệm được trình bày ở bảng 2. Trong đó, giá trị $\Delta\nu$ thu được từ phức I là tốt nhất, sai số so với thực nghiệm chỉ khoảng 1,4; 0,9 cm⁻¹ đối với phức CHCl₃...OSO và CDCl₃...OSO. Kết quả này làm chúng tôi bất ngờ, chính xác hơn hẳn giá trị được tính theo lý thuyết mà tác giả Michael đã đưa ra là 18,9 cm⁻¹ và 13,6 cm⁻¹ đối với phức giữa CHCl₃, CDCl₃ và SO₂ tương ứng.

Bảng 1 cho thấy, ngoài việc rút ngắn liên kết C-H(D), các thông số hình học của Cl, S, O cũng thay đổi. Liên kết C-Cl₄ rút ngắn đáng kể, trong khi hai liên kết của C-Cl₃ và C-Cl₅ lại kéo dài trong cả hai phức. Tương tự như vậy, liên kết S6-O7 dài ra, S6-O8 ngắn lại so với monome tương ứng. Sự rút ngắn và kéo dài này sẽ được giải thích trong phần phân tích NBO. Do bị bẻ cong, góc CH(D)...O7 còn khoảng 127° đến 130°. Điều đó chứng tỏ có sự xen phủ tốt giữa obitan có cặp electron riêng trên nguyên tử O

với obitan phản liên kết $\sigma^*(C-H)$.

Bảng 2: Giá trị thực nghiệm ν , $\Delta\nu$ của dao động hóa trị C-H(D) của phức CH(D)Cl₃ và SO₂

	CHCl ₃	CDCl ₃	CHCl ₃ -OSO	CDCl ₃ -OSO
ν (cm ⁻¹)	3032,9±0,05	2264,0±0,05	3040,5±1	2269,0±1
$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)			7,0	5,0

2. Phân tích AIM

Để xác nhận sự tồn tại của liên kết hiđrô trong hai phức I (C_s) và II (C₁), chúng tôi đã thực hiện phân tích hình học topo theo thuyết AIM cho điểm tới hạn liên kết (BCPs). Propelier và Colleagues [3] đã đề nghị một bộ tiêu chuẩn cho sự tồn tại liên kết hiđrô, trong đó thường được áp dụng nhất là mật độ electron ρ , Laplacian của mật độ $\nabla^2\rho$ của H...Y trong liên kết hiđrô X-H...Y trong khoảng 0,002 - 0,034 au; 0,02 - 0,14 au tương ứng. Giá trị ρ được dùng để mô tả độ bền của liên kết, ρ càng lớn thì liên kết càng bền. Nếu $\nabla^2\rho < 0$ thì liên kết là cộng hóa trị, và ngược lại thì là liên kết ion, liên kết hiđrô hay là tương tác Van der Waals. Tiêu chuẩn thứ 3 là trị riêng ma trận Hessian của ρ được kí hiệu λ và $|\lambda_1|/\lambda_3 < 1$ thì sẽ có liên kết hiđrô. Phân tích hình học topo theo thuyết AIM thu được ở bảng 3. Kết quả bảng 3 rất phù hợp với ba tiêu chuẩn trên, vì vậy trong các phức nghiên cứu liên kết giữa H2...O7 là liên kết hiđrô. Tuy nhiên, việc phân tích AIM không giải thích được bản chất của liên kết hiđrô chuyển dời xanh hay đỏ. Vấn đề này sẽ được làm sáng tỏ trong việc phân tích obitan liên kết thuần túy (NBO).

3. Phân tích NBO

Phân tích NBO tiến hành theo mức lí thuyết MP2/6-31++G(2d,2p), kết quả đưa ra ở bảng 4.

Theo Alabugin và cộng sự, sự thay đổi độ dài liên kết X-H được xác định bằng sự cân bằng của những yếu tố: liên kết X-H được kéo dài nhờ vào tương tác siêu liên hợp $n(Y) \rightarrow (\sigma^*X-H)$ và rút ngắn nhờ vào sự tái lai hóa của X trong X-H. Mặt khác Hobza [1, 2] cho rằng ảnh hưởng sự tái phân bố mật độ

electron có quan hệ với sự rút ngắn liên kết X-H. Tuy nhiên, chứng minh cho mối liên hệ này chưa được đưa ra. Trong phức IV, mật độ electron trong $\sigma(C1-H2)$ giảm và trong obitan $\sigma^*(C1-H2)$ tăng, nghĩa là liên kết C1-H2 dài ra khi hình thành phức. Tuy nhiên, nhìn bên trái ta thấy phần trăm đặc tính s của nguyên tử C tăng lên rất nhiều ứng với sự giảm chỉ số n trong lai hóa sp^n (từ $sp^{2,29}$ xuống $sp^{2,21}$), đồng thời diện tích trên C âm hơn, diện tích trên H dương hơn. Chính ảnh hưởng của 2 yếu tố này làm cho liên kết C1-H2 rút ngắn như ở bảng 1, hoàn toàn phù hợp với quy tắc Bent. Như vậy, có thể kết luận rằng trong phức IV(C₁), yếu tố quyết định sự rút ngắn liên kết C1-H2 là sự tái lai hóa của C và tái phân cực mặc dù mật độ electron do sự chuyển điện tích đến $\sigma^*(C1-H2)$ là khá cao ứng với năng lượng siêu liên hợp lớn 2,28 kcal.mol⁻¹. Trong phức I, mật độ electron ở obitan phản liên kết giảm, phần trăm đặc tính s tăng 0,77% (từ lai hóa $sp^{2,29}$ sang $sp^{1,95}$), đồng thời có sự tăng mật độ electron ở C và sự giảm mật độ electron ở H. Các yếu tố này đều thuận lợi cho rút ngắn liên kết C1-H2. Các yếu tố: tái lai hóa, tái phân cực, giảm mật độ electron đều thuận lợi cho sự rút ngắn liên kết nên C1-H2 trong phức I rút ngắn nhiều hơn trong phức IV. Trong cả hai phức I, IV liên kết C1-Cl4 đều giảm và C1-Cl3, C1-Cl5 đều tăng do sự gia giảm mật độ electron ở $\sigma^*(C1-Cl4)$, và sự tăng mật độ electron ở $\sigma^*(C1-Cl5)$, $\sigma^*(C1-Cl3)$ như ở bảng 4. Đồng thời, mật độ electron trên nguyên tử Cl4 giảm, trong khi trên Cl3, Cl5 lại tăng nên tương tác hút giữa C1 và Cl4 tăng. Ta thấy giá trị EDT đều âm, có trị tuyệt đối nhỏ hơn 0,01e và phức thu được thuộc loại có liên kết hiđrô chuyển dời xanh. Như vậy chỉ số EDT có thể được dùng để phân loại liên kết hiđrô [2, 10].

Bảng 3: Mật độ electron, Laplacian, trị riêng Hessian của ma trận mật độ

	$\rho(\text{H2...O7})$	$\nabla^2 \rho(\text{H2...O7})$	λ_1	λ_2	λ_3	$ \lambda_1 /\lambda_3$
$\text{CHCl}_3-\text{SO}_2 (\text{C}_1)$	0,0105	0,0397	-0,013	-0,012	0,064	0,20
$\text{CHCl}_3-\text{SO}_2 (\text{C}_s)$	0,0106	0,0408	-0,011	-0,010	0,062	0,18

Bảng 4: Phân tích NBO của phức I, IV theo MP2/6-31++G(2d,2p)

Phức	Liên kết	$\Delta\sigma(\text{C-X})$ $\cdot 10^{-3}(\text{e})$	$\Delta\sigma^*(\text{C-X})$ $\cdot 10^{-3}(\text{e})$	EDT(e)	H_1	$\Delta\%s$	$\Delta q \cdot 10^{-3}(\text{e})$		
							C	H	Cl
IV(C ₁)	C1H2	-0,22	0,12	-0,00026	0,462	7,81	-1,67	17,57	
	C1Cl3	-0,18	1,04						-13,2
	C1Cl4	-0,15	-1,69						5,69
	C1Cl5	-0,16	0,01						-8,65
		LPO7 $\rightarrow \sigma^*(\text{C1-H2})$		1,18					
		$\sigma^*(\text{S6O7,8}) \rightarrow \sigma^*(\text{C1-H2})$		1,10					
I(C _s)	C1H2	-0,005	-0,03	-0,00227	0,013	0,77	-0,18	18,35	
	C1Cl3	-0,18	0,46						-12,37
	C1Cl4	-0,14	-1,62						4,31
	C1Cl5	-0,18	0,46						-12,37
		LPO7 $\rightarrow \sigma^*(\text{C1-H2})$		2,02					
		R _E		1,70					

Trong đó: H_1 là chỉ số hidrô; $\Delta\%s$ là sự thay đổi đặc tính s của nguyên tử trong liên kết tương ứng (%). Δq (e) là sự thay đổi điện tích NBO; LP(X): LP là đôi e riêng của X, R_E là chỉ số năng lượng.

Số liệu bảng 4 cho thấy chỉ số H_1 của liên kết C1-H2 trong phức IV (C₁) là 0,462, lớn hơn 0,3 nhưng vẫn cho liên kết hidrô chuyển dời xanh. Do vậy, rõ ràng là chỉ số H_1 không phải là cơ sở để phân loại liên kết hidrô. Bởi vì sự thay đổi mật độ electron của $\sigma^*(\text{X-H})$ chịu hai ảnh hưởng đối lập nhau là tương tác siêu liên hợp $n(\text{Y})$ và $\sigma(\text{Y-U}) \rightarrow \sigma^*(\text{X-H})$ làm tăng mật độ electron và giảm mật độ electron do tương tác siêu liên hợp $n(\text{Z})$ và $\sigma(\text{W-Z}) \rightarrow \sigma^*(\text{X-H})$ của phức so với monome. Từ đó, chúng tôi mạnh dạn bước đầu đưa ra biểu thức định lượng sau:

$$R_E = \frac{E_H^{(2)}}{E_{\text{LM} \rightarrow \text{C}}^{(2)}} \quad (4)$$

Trong đó:

$$E_H^{(2)} = E^{(2)}[n(\text{Y}) \text{ và } \sigma(\text{Y-U}) \rightarrow \sigma^*(\text{X-H})] \text{ và}$$

$$E_{\text{LM} \rightarrow \text{C}}^{(2)} = E_{\text{LM}}^{(2)}[n(\text{Z}) \text{ và}$$

$$\sigma(\text{W-Z}) \rightarrow \sigma^*(\text{X-H})] - E_{\text{LC}}^{(2)}[n(\text{Z})$$

$$\text{và } \sigma(\text{W-Z}) \rightarrow \sigma^*(\text{X-H})]$$

Với $E_H^{(2)}$, $E_{\text{LM}}^{(2)}$, $E_{\text{LC}}^{(2)}$ lần lượt là tổng năng lượng siêu liên hợp của phức, tổng năng lượng tương tác của phần tử cho proton biệt lập và tổng năng lượng tương tác để chuyển $\bar{e}$ đến $\sigma^*(\text{X-H})$ khi đã hình thành phức theo thuyết nhiễu loạn bậc 2. Dựa vào phương trình (4) thấy rằng khi chỉ số R_E càng nhỏ, mật độ electron ở $\sigma^*(\text{X-H})$ càng nhỏ, ảnh hưởng của sự tái phân bố mật độ electron càng nhỏ và liên kết X-H

càng được rút ngắn. Kết quả tính hai phức trên, thấy rằng R_E của phức I (C_s) nhỏ hơn phức IV (C_1) và kết quả về độ dài liên kết, tần số dao động hóa trị của liên kết C1-H2 là hoàn toàn phù hợp. Hi vọng chỉ số này sẽ được nghiên cứu sâu hơn trong các bài báo sau.

IV - KẾT LUẬN

Đã dự đoán được 4 cấu trúc bền của phức như ở hình 1, có 3 cấu trúc thuộc nhóm điểm đối xứng C_s bền hơn và 1 thuộc nhóm điểm đối xứng C_1 kém bền hơn. Các phức đều cho liên kết hiđrô chuyển dời xanh ứng với tần số dao động hóa trị liên kết C-H(D) tăng, tuy nhiên cường độ hồng ngoại không giảm mà lại tăng, cho thấy đạo hàm mômen lưỡng cực dương theo tọa độ X-H của phân tử cho proton vẫn có thể cho liên kết hiđrô chuyển dời xanh.

Kết quả tính theo mức lý thuyết cao MP2/6-31++G(2d,2p) cho giá trị tần số dao động hóa trị phù hợp rất tốt với giá trị thực nghiệm. Từ việc phân tích NBO, chúng tôi nhận xét rằng: yếu tố quyết định đến sự rút ngắn liên kết C-H là sự tăng đặc tính lai hóa s, tái phân cực và ảnh hưởng của sự tái phân bố mật độ electron nhỏ. Sự chuyển mật độ electron tổng EDT vẫn là yếu tố đáng được xem xét để phân loại liên kết hiđrô; tuy nhiên chỉ số H_i không phải là yếu tố quyết định đến sự chuyển dời xanh của tần số

dao động hóa trị hồng ngoại.

Công trình này được tài trợ kinh phí từ đề tài, mã số 5 020 06 của Hội đồng Khoa học Tự nhiên Quốc gia.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Wiktor Zierkiewicz, Danuta Michalska, Zdenek Havlas, and Pavel Hobza. Chemphyschem, 3, 511 - 518 (2002).
2. Wiktor Zierkiewicz, Petr Jurecka, and Pavel Hobza. ChemPhysChem, 6, 609 - 617 (2005).
3. An Yong Li. J. Phys. Chem. A., 110, 10805 - 10816 (2006).
4. M. Hippler. J. Chem. Phys., 123, 204311 (2005).
5. Susan Chung, Michael Hippler. J. Chem. Phys., 124, 214316 - 21421 (2006).
6. Nguyễn Tiến Trung, Trần Thành Huế, Nguyễn Minh Thọ, Nguyễn Thị Minh Huệ. Tạp chí Hóa học, T. 45 (2), Tr. 162 - 168 (2007).
7. Ying Liu, Wenqing Liu, Haiyang Li, Yong Yang, Shuang Cheng. International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 107, 396 - 402 (2007).