

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT CỦA TƯƠNG TÁC GIỮA CH_3COCH_3 , $\text{CH}_3\text{COCHX}_2$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) VỚI HNO BẰNG PHƯƠNG PHÁP HÓA HỌC LƯỢNG TỬ

Nguyễn Thị Thu Trang¹, Đỗ Thanh Hiền², Trần Thành Huế³, Nguyễn Văn Thắng⁴,
Nguyễn Tiến Trung⁴

¹Đại học Hải Phòng

²THPT Thăng Long-Hà Nội

³Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

⁴Đại học Quy Nhơn

Đến Tòa soạn 5-3-2011

Abstract

Obtained binding energies corrected by both ZPE and BSSE range from 10.6 to 14.0 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ at the level of theory MP2/aug-cc-pVDZ, indicating the existence of stable complexes of interactions between acetone, its halogen-substituted derivatives ($\text{CH}_3\text{COCHX}_2$, with $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) and HNO . The significantly blue shift of the N-H bond was achieved in these systems with increase of stretching frequency by about 110 cm^{-1} as a result of complexation. This is a remarkable observation because the contraction of N-H covalent bond has rarely been detected due to its high polarity. Along with contraction of the N-H bond length, its increment of stretching frequency and decrement of infrared intensity, the stretching frequency blue shift of C-H bond involved in hydrogen bond is also predicted in **D1.2**. On the other hand, the red shifting hydrogen bonds of C-H...O type are observed in the remaining complexes **D1**, **D1.3** and **D1.4**. The obtained results show that the red shift of C-H covalent bond involved in hydrogen bond increases in going from fluoride-substituted derivative of acetone ($\text{CH}_3\text{COCHX}_2$) via chlorine one and finally to bromide one, indicating that the more the polarization of C-H bond is the more the red shift of C-H bond is.

1. GIỚI THIỆU

Được phát hiện bằng thực nghiệm lần đầu tiên vào năm 1980 [1], đến nay liên kết hydro chuyển dời xanh đã được nghiên cứu rất nhiều cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm [1 - 6]. Tuy nhiên, bản chất liên kết hydro chuyển dời xanh đến nay vẫn còn là câu hỏi lớn. Phần lớn các nghiên cứu đều tập trung vào liên kết hydro chuyển dời xanh với sự tham gia của liên kết C-H, sự chuyển dời xanh của liên kết N-H gần đây mới được phát hiện và ít được biết đến [2 - 6]. Nghiên cứu hiện tại khảo sát các phức hình thành giữa axeton (AXE) và dẫn xuất thế halogen của nó ($\text{CH}_3\text{COCHX}_2$, với $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) với HNO nhằm giải quyết các vấn đề sau: (1) phát hiện thêm nhiều phức có liên kết hydro chuyển dời xanh, bổ sung thêm dữ liệu khoa học về loại liên kết này, nhất là liên kết hydro chuyển dời xanh với sự tham gia của liên kết cộng hóa trị N-H; (2) xem xét sự ảnh hưởng của độ phân cực liên kết C-H trong axeton và dẫn xuất thế halogen của nó đến loại liên kết hydro hình thành và mức độ chuyển dời xanh, đỏ; (3) Từ đó làm cơ sở để tiến tới đưa ra mô hình chung cho vấn đề bản chất liên kết hydro chuyển dời xanh và sự phân loại liên

kết hydro trong tương lai.

2. PHƯƠNG PHÁP TÍNH

Dạng cấu trúc bền của các monome và các phức được tối ưu ở mức lý thuyết cao MP2/aug-cc-pVDZ. Năng lượng tương tác được hiệu chỉnh ZPE và BSSE. Mật độ electron trên obitan phân tử, hệ số obitan lai hóa, năng lượng tương tác siêu liên hợp 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) và điểm tới hạn vòng (RCPs: Ring Critical Points) được tính theo thuyết AIM (Atoms In Molecule). Các thông số trên được tính bằng phần mềm Gaussian 03 (phiên bản E.01) [7] và phần mềm AIM 2000 [8].

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

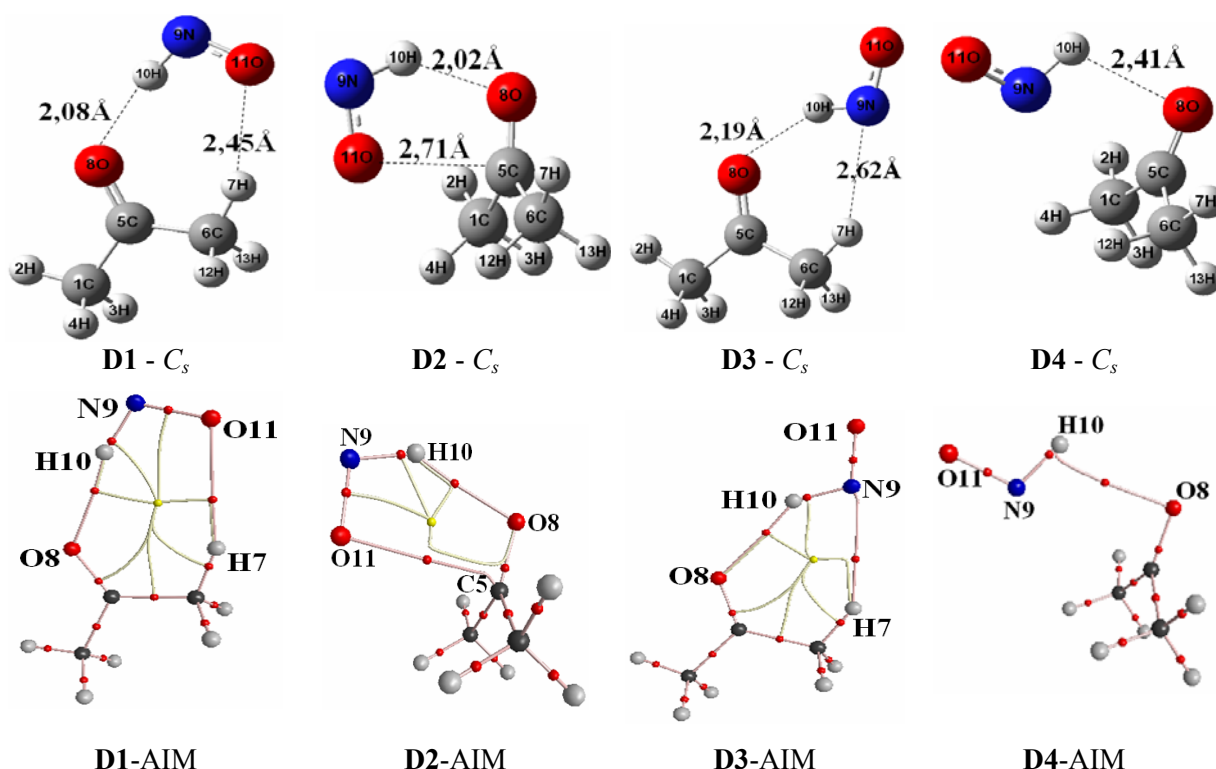
Kết quả tối ưu tại mức lý thuyết MP2/aug-cc-pVDZ đối với AXE cho kết quả phù hợp rất tốt so với thực nghiệm. Độ dài liên kết C=O, liên kết C-C và góc liên kết $\angle \text{CCC}$ của AXE tính được là

1,2308 Å; 1,5182 Å và 116,5°; trong khi thực nghiệm là 1,2165 Å; 1,5048 Å và 115,5° tương ứng [9]. Cũng tại mức lý thuyết này, độ dài liên kết N-H và N=O trong HNO lần lượt là 1,0595 và 1,2325 Å (thực nghiệm là 1,0590 và 1,2090 Å) [9]. Do vậy, mức lý thuyết được chọn đáng tin cậy và hợp lý cho việc xem xét hệ nghiên cứu.

3.1. Phức giữa axeton với HNO

Tiến hành tối ưu hình học các phức giữa AXE với HNO ở MP2/aug-cc-pVDZ thu được bốn cấu trúc **D1**, **D2**, **D3** và **D4**; tất cả đều thuộc nhóm điểm đối xứng C_s (hình 1). Các phức thu được đều khá bền vì giá trị năng lượng tương tác tính được có trị

số âm lớn. Cụ thể, năng lượng tương tác hiệu chỉnh cả ZPE và BSSE (ΔE^*) của **D1**, **D2**, **D3** và **D4** lần lượt là -13,1, -14,0, -11,6 và -11,1 kJ.mol⁻¹. Như vậy, **D2** là phức bền nhất trong các hình học bền được dự đoán ở trên và bền hơn so với các phức được hình thành với HNO công bố trước đây. Cụ thể, dime của HNO có ΔE^* khoảng -8,0 kJ.mol⁻¹ (MP2/aug-cc-pVTZ) [10], HCHO...HNO khoảng -9,2 kJ.mol⁻¹, FCHO...HNO khoảng -8,9 kJ.mol⁻¹ (G3B3) [2], CHY₃...HNO (Y=F, Cl, Br) với ΔE^* từ -7,7 đến -3,5 kJ.mol⁻¹ (MP2/6-311++G(d,p)) [4] và XCHZ...HNO (X=F, Cl, Br, H, CH₃; Z=O, S) có trị số ΔE^* trong khoảng từ -13,6 đến -10,1 kJ.mol⁻¹ (MP2/aug-cc-pVTZ) [5].



Hình 1: Dạng hình học tối ưu và phân tích AIM của phức giữa axeton và HNO (các hình cầu nhỏ ở giữa 2 nguyên tử tương tác là BCP và ở giữa vòng là RCP)

Từ dạng hình học kết hợp với phân tích AIM cho thấy, trong **D1** và **D3** tồn tại hai liên kết hydro, đó là N-H...O, C-H...O (hình **D1**-AIM); N-H...O, C-H...N (hình **D3**-AIM). **D2** tồn tại đồng thời liên kết hydro và tương tác axit-bazơ Lewis (hình **D2**-AIM), trong **D4** hình thành liên kết hydro giữa O8 (AXE) và H10 (HNO) (hình **D4**-AIM). Các phức **D1**, **D2** và **D3** đều có cấu trúc vòng, được minh chứng bởi sự tồn tại của một điểm tới hạn vòng (RCP) trong cả ba cấu trúc.

Khi phân tích tương tác N-H...O, trong tất cả các phức đều nhận thấy có sự rút ngắn độ dài liên kết, tăng tần số dao động hóa trị và giảm cường độ hồng ngoại của liên kết N-H so với monome ban đầu

(bảng 1). Như vậy, các liên kết hydro kiểu N-H...O trong các phức đều thuộc loại chuyển dời xanh. Đặc biệt, phát hiện sự chuyển dời xanh tần số dao động hóa trị rất mạnh của liên kết N-H khi phức hình thành, lên tới 122,6 cm⁻¹ trong phức **D3**. Sự phát hiện này ít được công bố trước đây. Kết quả thu được trong nghiên cứu này cùng với số liệu đã công bố cho thấy sự rút ngắn và chuyển dời xanh của liên kết N-H do thuộc tính đặc trưng của HNO [4, 5].

3.2. Phức giữa dẫn xuất thế halogen của axeton (CH₃COCHX₂) với HNO

Với mục đích khảo sát ảnh hưởng độ phân cực

của liên kết C-H và N-H đến loại liên kết hydro tương ứng khi phức hình thành, chúng tôi chọn phức **D1** có cả hai kiểu liên kết hydro C-H...O và N-H...O,

và là dạng hình học bền thứ hai làm hình học tối ưu cơ sở để tiếp tục xem xét tương tác giữa các dẫn xuất thế halogen của axeton với HNO.

Bảng 1: Sự thay đổi độ dài liên kết (Δr), tần số dao động hóa trị ($\Delta \nu$) và cường độ hồng ngoại (ΔI) của liên kết N-H trong **D1**, **D2**, **D3** và **D4** so với trong monome HNO ban đầu

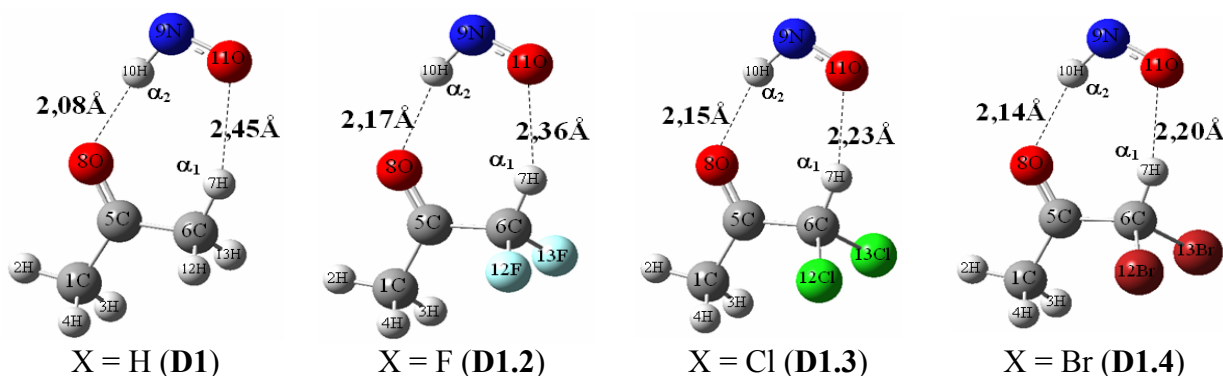
	D1	D2	D3	D4
$\Delta r(\text{N-H})$ (Å)	-0,0057	-0,0009	-0,0062	-0,0033
$\Delta \nu(\text{N-H})$ (cm^{-1})	116,9	46,8	122,6	64,2
$\Delta I(\text{N-H})$ (km.mol^{-1})	-57,6	-96,5	-105,1	-73,3

(Số chữ số ở phần thập phân của trị số r, ν , I và E trong bài báo này được lấy theo thông lệ quốc tế).

3.2.1. Dạng hình học, tần số dao động hóa trị, cường độ hồng ngoại

Hình học tối ưu của các phức cực tiểu năng lượng trên bề mặt thế năng (dạng **D1**) giữa

$\text{CH}_3\text{COCHX}_2$ (X = F, Cl, Br) với HNO tại mức lý thuyết MP2/aug-cc-pVDZ được đưa ra trong hình 2. Tất cả các phức thu được đều có dạng vòng và đều thuộc nhóm điểm đối xứng C_s . Một số kết quả tiêu biểu của các phức được đưa ra ở bảng 2.



Hình 2: Dạng hình học bền của phức giữa $\text{CH}_3\text{COCHX}_2$ (X=H, F, Cl, Br) với HNO

Bảng 2: Các đại lượng tiêu biểu khi phức hình thành tại MP2/aug-cc-pVDZ

Phức	ΔE^* , kJ.mol^{-1}	$\Delta r(\text{C6-H7})$, Å	$\Delta \nu(\text{C6-H7})$, cm^{-1}	$\Delta I(\text{C6-H7})$, km.mol^{-1}	$\Delta r(\text{N9-H10})$, Å	$\Delta \nu(\text{N9-H10})$, cm^{-1}	$\Delta I(\text{N9-H10})$, km.mol^{-1}
D1	-13,1	0,0003	-3,5	0,9	-0,0057	116,9	-57,6
D1.2	-10,6	-0,0005	9,9	-11,3	-0,0057	116,1	-87,0
D1.3	-11,8	0,0004	-6,2	58,7	-0,0055	114,6	-85,7
D1.4	-12,4	0,0006	-10,4	85,3	-0,0054	112,7	-84,9

Từ hình 2 ta thấy, tất cả các khoảng cách H7...O11, O8...H10 đều nhỏ hơn tổng bán kính van der Waals của hai nguyên tử tương ứng (2,27 Å đối với tổng của O và H). Thêm vào đó, những góc liên kết α_1 , α_2 đều lớn hơn 90° - đây là ngưỡng giới hạn dưới cho sự hình thành liên kết hydro [5]. Cụ thể, trị số α_1 và α_2 nằm trong giới hạn $157,4 - 166,1^\circ$; $157,7-167,4^\circ$ tương ứng. Vì vậy, sự tiếp xúc trong các phức cực tiểu **D1.2**, **D1.3** và **D1.4** có thể phân

loại ban đầu như những liên kết hydro. Theo kết quả bảng 2, năng lượng tương tác từ **D1** đến **D1.4** đều âm, trị số âm khá lớn, nghĩa là phức hình thành khá bền. Độ bền các phức tăng theo thứ tự **D1.2** < **D1.3** < **D1.4** < **D1**. Như vậy, khi thế 2 nguyên tử H của nhóm CH_3 trong AXE bởi hai halogen làm giảm độ bền các phức tương ứng so với phức giữa AXE với HNO, tuy nhiên đi từ dẫn xuất thế F đến Br, độ bền của các phức tăng dần.

Từ kết quả bảng 2 cho thấy, độ dài liên kết C6-H7 kéo dài, tần số dao động hóa trị giảm, cường độ hồng ngoại tương ứng tăng trong **D1**, **D1.3** và **D1.4**. Sự thay đổi ngược lại đối với phức **D1.2**. Như vậy, có thể phân loại liên kết hydro C6-H7...O11 thuộc loại chuyển dời đỏ trong các phức **D1**, **D1.3**, **D1.4** và chuyển dời xanh trong phức **D1.2**. Đối với liên kết hydro N9-H10...O8, liên kết N9-H10 bị rút ngắn, tần số dao động hóa trị tăng, cường độ hồng ngoại tương ứng giảm trong tất cả các phức, do đó liên kết hydro này thuộc loại chuyển dời xanh. Đây là phát hiện khá thú vị, vì so với liên kết C-H, liên kết cộng hóa trị N-H phân cực hơn do độ âm điện của nguyên tử N lớn hơn. Mức độ chuyển dời đỏ và chuyển dời xanh của liên kết C6-H7 trong liên kết hydro C6-H7...O11 khá nhỏ. Ngược lại, mức độ chuyển dời xanh của liên kết N9-H10 trong liên kết hydro N9-H10...O8 rất mạnh, gấp khoảng 12 lần sự chuyển dời xanh của liên kết C6-H7 trong **D1.2** (bảng 2). Đi từ dẫn xuất thế F tới Br của CH₃COCHX₂...HNO, mức độ chuyển dời đỏ của liên kết hydro C6-H7...O11 tăng dần, mức độ chuyển dời xanh của liên kết hydro N9-H10...O8 giảm dần. Sự biến đổi này phù hợp với sự biến đổi năng lượng tương tác, và nguyên nhân

do từ dẫn xuất thế F đến Br khả năng tách proton H7 của liên kết C6-H7 và sự proton hóa tại O8 trong các monome tương ứng ban đầu trở nên dễ hơn. Thật vậy, tại mức lý thuyết MP2/aug-cc-pVDZ, năng lượng tách proton H7 lần lượt là 1594, 1532, 1516 kJ.mol⁻¹; ái lực proton tại O8 lần lượt là -716; -740 và -748 kJ.mol⁻¹ đối với các monome dẫn xuất thế từ F đến Br tương ứng. Tóm lại, liên kết tham gia trong liên kết hydro của phân tử cho proton càng phân cực và độ bazơ của phân tử nhận proton càng mạnh thì mức độ chuyển dời đỏ càng chiếm ưu thế, liên kết hydro càng bền; ngược lại, liên kết tham gia trong liên kết hydro của phân tử cho proton càng ít phân cực và độ bazơ của phân tử nhận proton càng yếu thì mức độ chuyển dời xanh càng chiếm ưu thế, liên kết hydro càng kém bền (xem bảng 2).

3.2.2. Phân tích AIM

Dạng hình học topo cho các phức của tương tác giữa CH₃COCHX₂ (X = H, F, Cl, Br) với HNO tương tự như dạng **D1**-AIM (hình 1). Các thông số hình học của các điểm tới hạn theo thuyết AIM trong các phức khảo sát tính tại MP2/aug-cc-pVDZ được tập hợp ở bảng 3.

Bảng 3: Thông số hình học (hình 1) điểm tới hạn của tương tác giữa CH₃COCHX₂ (X = H, F, Cl, Br) với HNO

Điểm tới hạn		D1		D1.2		D1.3		D1.4	
		$\rho(r)$ (au)	$\nabla^2(\rho(r))$ (au)	$\rho(r)$ (au)	$\nabla^2(\rho(r))$ (au)	$\rho(r)$ (au)	$\nabla^2(\rho(r))$ (au)	$\rho(r)$ (au)	$\nabla^2(\rho(r))$ (au)
BCP	H7...O11	0,010	0,030	0,012	0,034	0,016	0,043	0,016	0,052
	O8...H10	0,021	0,058	0,017	0,049	0,018	0,050	0,018	0,057
RCP		0,004	0,023	0,004	0,022	0,005	0,026	0,005	0,024

Kết quả đạt được cho thấy, trong mỗi cấu trúc đều tồn tại hai điểm tới hạn của sự tiếp xúc H7...O11 và O8...H10. Giá trị mật độ electron và laplacian của sự tiếp xúc H7...O11 trong khoảng 0,010-0,016 au và 0,030-0,052 au tương ứng; còn của sự tiếp xúc O8...H10 trong khoảng 0,017-0,021 au và 0,049-0,058 au tương ứng. Tất cả các giá trị của hai đại lượng này đều nằm trong giới hạn được đề nghị cho liên kết hydro. Trong mỗi phức đều tồn tại một điểm tới hạn vòng (RCP) minh chứng có tồn tại cấu trúc vòng. Mật độ electron trong tương tác H7...O11 tăng dần từ **D1** tới **D1.4**, chứng tỏ độ bền liên kết hydro C6-H7...O11 tăng lên khi thay thế halogen đi từ X là F tới Br. Ngược lại, mật độ electron trong tương tác O8...H10 lớn nhất ở phức **D1** và giảm đi nhiều trong các phức còn lại (**D1.2**, **D1.3**, **D1.4**). Kết quả này phù hợp với khoảng cách O8...H10 trong **D1** ngắn nhất, độ bền của **D1** lớn nhất. Đi từ dẫn xuất thế F

tới Br của CH₃COCHX₂...HNO, mật độ electron của sự tiếp xúc này tăng nhẹ, tương ứng độ bền liên kết N9-H10...O8 tăng. Như vậy, liên kết hydro N9-H10...O8 quyết định độ bền phức **D1**, với các phức còn lại, độ bền của phức do cả hai loại liên kết hydro đóng góp.

3.2.3. Phân tích NBO

Phân tích NBO cho cả các monome và các phức tại mức lý thuyết MP2/aug-cc-pVDZ, kết quả được tóm tắt trong bảng 4. Từ bảng 4 ta thấy, EDT - sự chuyển mật độ electron tổng - có trị số dương ứng với phức của AXE với HNO nên mật độ electron chuyển từ AXE đến HNO. Ngược lại, EDT của các phức CH₃COCHX₂...HNO (X=F, Cl, Br) có trị số âm, tức mật độ electron chuyển từ HNO đến CH₃COCHX₂. Nhìn chung, mật độ electron tổng có giá trị trong khoảng 0,0026-0,0088 e.

Bảng 4: Phân tích NBO của các phức **D1**, **D1.2**, **D1.3** và **D1.4**

	D1	D1.2	D1.3	D1.4
EDT (e)	0,0072	-0,0026	-0,0079	-0,0088
$\Delta\sigma^*(\text{C6-H7})$ (e)	0,0062	0,0056	0,0090	0,0102
$\Delta\%s(\text{C6})$	0,68	0,97	1,02	1,44
$E_{\text{inter}}(n(\text{O11}) \rightarrow \sigma^*(\text{C6-H7}))$ (kJ.mol ⁻¹)	2,82	4,39	6,47	6,97
$\Delta E_{\text{intra}}(n(\text{X}) \rightarrow \sigma^*(\text{C6-H7}))$ (kJ.mol ⁻¹)	0	-0,55	-0,54	-0,58
$\Delta\sigma^*(\text{N9-H10})$ (e)	-0,0058	-0,0091	-0,0083	-0,0078
$\Delta\%s(\text{N9})$	3,56	2,75	2,89	2,96
$E_{\text{inter}}(n(\text{O8}) \rightarrow \sigma^*(\text{N9-H10}))$ (kJ.mol ⁻¹)	7,68	4,97	5,26	5,49
$\Delta E_{\text{intra}}(n(\text{O11}) \rightarrow \sigma^*(\text{N9-H10}))$ (kJ.mol ⁻¹)	-8,46	-7,32	-7,67	-7,74

E_{inter} : năng lượng tương tác siêu liên hợp ngoại phân tử;

ΔE_{intra} : biến thiên năng lượng tương tác siêu liên hợp nội phân tử.

Năng lượng tương tác siêu liên hợp ngoại phân tử từ 2 cặp electron tự do của O11 đến $\sigma^*(\text{C6-H7})$ lớn hơn độ giảm của tương tác siêu liên hợp nội phân tử, dẫn tới mật độ electron trên orbital này tăng lên trong khoảng 0,0056-0,0102 e. Ngược lại, năng lượng tương tác siêu liên hợp ngoại phân tử từ 2 cặp electron tự do của O8 đến $\sigma^*(\text{N9-H10})$ nhỏ hơn độ giảm của tương tác siêu liên hợp nội phân tử, dẫn đến mật độ electron trên orbital $\sigma^*(\text{N9-H10})$ giảm (0,0058-0,0091 e). Phần trăm đặc tính s của các nguyên tử C6 và N9 đều gia tăng trong tất cả các phức, phù hợp với quy tắc Bent [11] về dự đoán đặc tính s tăng của nguyên tử A trong liên kết A-H khi H trở nên dương điện hơn. Thật vậy, điện tích dương trên H7 tăng khoảng 0,004-0,012 e, trên H10 tăng khoảng 0,046-0,053 e. Như vậy, sự rút ngắn độ dài liên kết N9-H10 và sự chuyển dời xanh tần số dao động hóa trị tương ứng nhờ vào sự giảm mật độ electron ở $\sigma^*(\text{N9-H10})$ và tăng phần trăm đặc tính s của orbital lai hóa N9. Tuy nhiên, đối với liên kết hydro C6-H7...O11 trong **D1**, **D1.3** và **D1.4**, sự gia tăng của độ dài liên kết C6-H7 và sự chuyển dời đỏ tần số dao động hóa trị tương ứng phụ thuộc chủ yếu vào độ tăng mật độ electron ở orbital $\sigma^*(\text{C6-H7})$. Sự chuyển dời xanh trong phức **D1.2** có nguyên nhân chủ yếu do sự gia tăng phần trăm đặc tính s của nguyên tử C6.

4. KẾT LUẬN

- Kết quả tối ưu thu được các phức bền giữa AXE với HNO là **D1**, **D2**, **D3** và **D4**; giữa các dẫn xuất thế halogen của AXE ($\text{CH}_3\text{COCHX}_2$) với HNO là **D1.2**, **D1.3**, **D1.4**. Các phức **D1.2**, **D1.3**, **D1.4** có độ bền theo thứ tự tăng dần với năng lượng tương tác trong khoảng từ -10,6 đến -12,4 kJ.mol⁻¹. Do vậy, sự thế 2H bởi hai halogen của nhóm CH_3 trong

monome ban đầu AXE gây nên độ bền của phức với HNO giảm, tuy nhiên đi từ dẫn xuất thế F đến Br độ bền của phức với HNO tăng lên.

- Các phức **D1**, **D1.2**, **D1.3** và **D1.4** đều có cấu trúc vòng với sự xuất hiện hai liên kết hydro: liên kết hydro C6-H7...O11 thuộc loại chuyển dời đỏ trong các phức **D1**, **D1.3**, **D1.4**, tuy nhiên chuyển dời xanh trong phức **D1.2**; liên kết hydro N9-H10...O8 thuộc loại chuyển dời xanh trong tất cả các phức khảo sát. Mức độ chuyển dời xanh tần số dao động của liên kết N-H đạt được là rất lớn, lên tới khoảng 110 cm⁻¹. Sự phát hiện này rất ít được phát hiện trước đây.

- Từ kết quả đạt được chúng tôi nhận thấy, liên kết tham gia trong liên kết hydro của phần tử cho proton càng phân cực và độ bazơ của phần tử nhận proton càng mạnh thì mức độ chuyển dời đỏ càng chiếm ưu thế, liên kết hydro càng bền và ngược lại.

- Kết quả phân tích NBO cho thấy sự chuyển dời đỏ của liên kết hydro C6-H7...O11 trong **D1**, **D1.3**, **D1.4** phụ thuộc chủ yếu vào sự tăng mật độ electron ở $\sigma^*(\text{C6-H7})$, còn sự chuyển dời xanh trong **D1.2** có nguyên nhân chủ yếu do sự tăng của phần trăm đặc tính s của nguyên tử C6. Đối với liên kết hydro N9-H10...O8, sự chuyển dời xanh của N9-H10 phụ thuộc vào cả 2 yếu tố: giảm mật độ electron ở $\sigma^*(\text{N9-H10})$ và tăng phần trăm đặc tính s của orbital lai hóa N9.

Công trình được hoàn thành dưới sự tài trợ của Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED), mã số 104.03.142.09.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Trudeau G. T., Dumas J.-M., Dupuis P., Guerin M. and Sandorfy C., Top. Curr. Chem., 93, 91 - 123 (1980).

2. Liu Y., Liu W. Q., Li H. Y., Yang Y. and Cheng S., Chin. J. Chem., 25, 44 - 52 (2007).
3. Yang Y., Zhang J. W. and Gao X. M., Int. J. Quantum Chem., 106, 1199 - 1207 (2006).
4. Nguyen Tien Trung, Tran Thanh Hue and Minh Tho Nguyen. Phys. Chem. Chem. Phys., 11, 926 - 933 (2009).
5. Nguyen Tien Trung, Tran Thanh Hue and Minh Tho Nguyen. J. Phys. Chem. A, 113(13), 3245 - 3253 (2009).
6. Liu Y., Liu W. Q., Li H. Y., Yang Y. and Cheng S., Int. J. Quantum Chem., 107, 396 - 402 (2007).
7. Frisch M. J. et al., Gaussian 03 (revision E.01), Gaussian: Wallingford, CT (2004).
8. Biegler-König F., AIM 2000, University of Applied Sciences: Bielefeld, Germany (2000).
9. NIST webpage: <http://webbook.nist.gov/chemistry>.
10. Solimannejad M., Massahi S. and Alkorta I., Phys. Chem., 362, 1 - 7 (2009).
11. Bent H. A., Chem. Rev., 61, 275 - 311 (1961).

Liên hệ: **Nguyễn Thị Thu Trang**

Đại học Hải Phòng

171 Phan Đăng Lưu - Quận Kiến An - Thành phố Hải Phòng

Email: nguyenthutrangdhhp@gmail.com