

用LOL- π 分析展示B₃N₃六元环的离域 π 电子和芳香性 ——推荐一个普适性的计算化学实验

程学礼^{*}, 赵燕云, 左健, 嵇林海, 孙媛媛

泰山学院化学化工学院, 山东 泰安 271000

Revealing the Delocalized π -Electrons and Aromaticity of the B₃N₃ Six-Membered Ring Using LOL- π Analysis

Xueli Cheng ^{*}, Yanyun Zhao, Jian Zuo, Linhai Zhuo, Yuanyuan Sun

School of Chemistry and Chemical Engineering, Taishan University, Tai'an 271000, Shandong Province, China.

^{*}通讯作者, Email: x_cheng@tsu.edu.cn

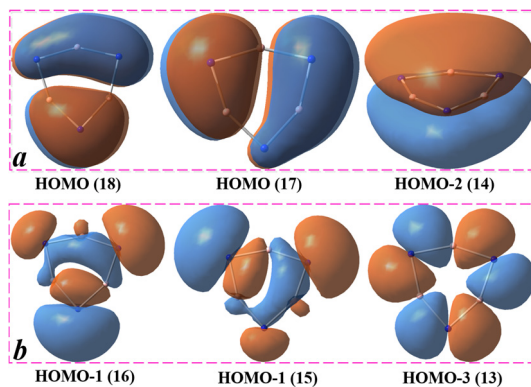
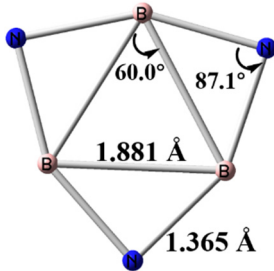


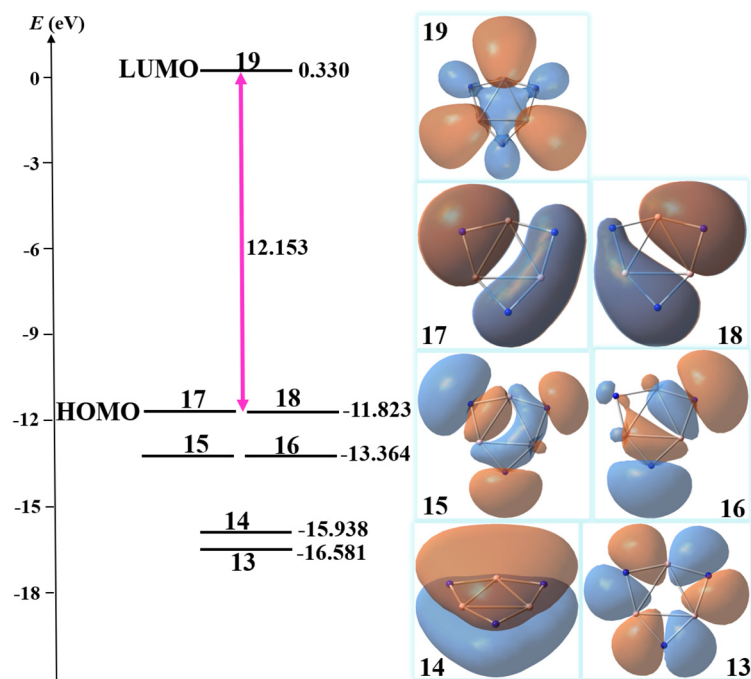
图 S1 用 GaussView 展示的 B₃N₃ 六元环第 14、17-19 号 MO (Isovalue=0.02 e)

Table S1 绘制 B₉N₉ 环平面上的 LOL- π 填色图步骤及操作说明

指令或操作	输入指令的意义或说明
6	检查并修改波函数
26	修改轨道占据数
0	选择所有轨道
0	把轨道占据数清零
13,15,16	选择环平面上的 3 个 π 轨道
2	恢复占据数为原本的 2
q (或 00)	返回
-1	返回主菜单
5	计算格点数据
10	LOL 分析
2	中等质量格点 (计算极快且格点数量对绘图影响不大, 选择 1 或 3 均可)
-1	观看等值面, 可以判断正是环平面上的离域 π 键, 进行某些显示设置, 如减小键判断阈值可使后续操作中 B-B 键不显示
返回	点击 Return 退出图形界面
0	返回主菜单
4	绘制平面图
10	LOL
1	填色图
回车	用默认的格点设定
1	选择 XY 平面绘制 LOL- π 填色图
0	设置 Z=0
右击	右击关闭图像。图形已有不错的效果(如图 3(a)), 如想获得更好的图像效果, 可按图 2(b)的方式设置。 若采用过渡色彩显示, 可依次输入:
4	显示原子标签
7	青色
8	显示化学键 (因 N 的孤电子对明显, 显示化学键效果更佳)
14	棕色
19	修改色彩过渡方式
13	黑-橙-黄
18	修改原子标签类型
1	仅显示元素符号 (因未介绍修改原子编号的方法, 显示序号效果不佳)
-1	重新绘图, 即为图 3(b)的图像效果

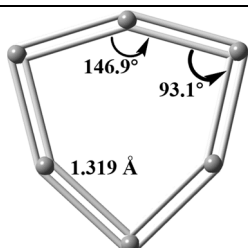
Table S2 用# opt=Cartesian Freq MP2/def2TZVP 关键词优化的 B₃N₃ 结构及坐标

优化结构参数	分子坐标			
	B	-0.44205883	-0.99209140	0.00000121
	B	-0.63814804	0.87887919	-0.00000042
	B	1.08020715	0.11321210	0.00000039
	N	-1.52440679	-0.15976630	-0.00000028
	N	0.90056529	-1.24028955	-0.00000069
	N	0.62384130	1.40005594	0.00000013

图 S2 MP2/def2-TZVP 水平上优化得到的 B₃N₃ 13-19 号轨道(Isovalue=0.02 e)及轨道能级图

轨道能以 eV 为单位

Table S3 B3LYP-D3(BJ)/def2-TZVP 方法优化的 C₆ 分子结构及坐标

优化结构参数	分子坐标			
	C	0.00000000	1.46035900	-0.00066300
	C	0.95742700	0.55277100	0.00066300
	C	1.26470800	-0.73018000	-0.00066300
	C	0.00000000	-1.10554200	0.00066300
	C	-1.26470800	-0.73018000	-0.00066300
	C	-0.95742700	0.55277100	0.00066300

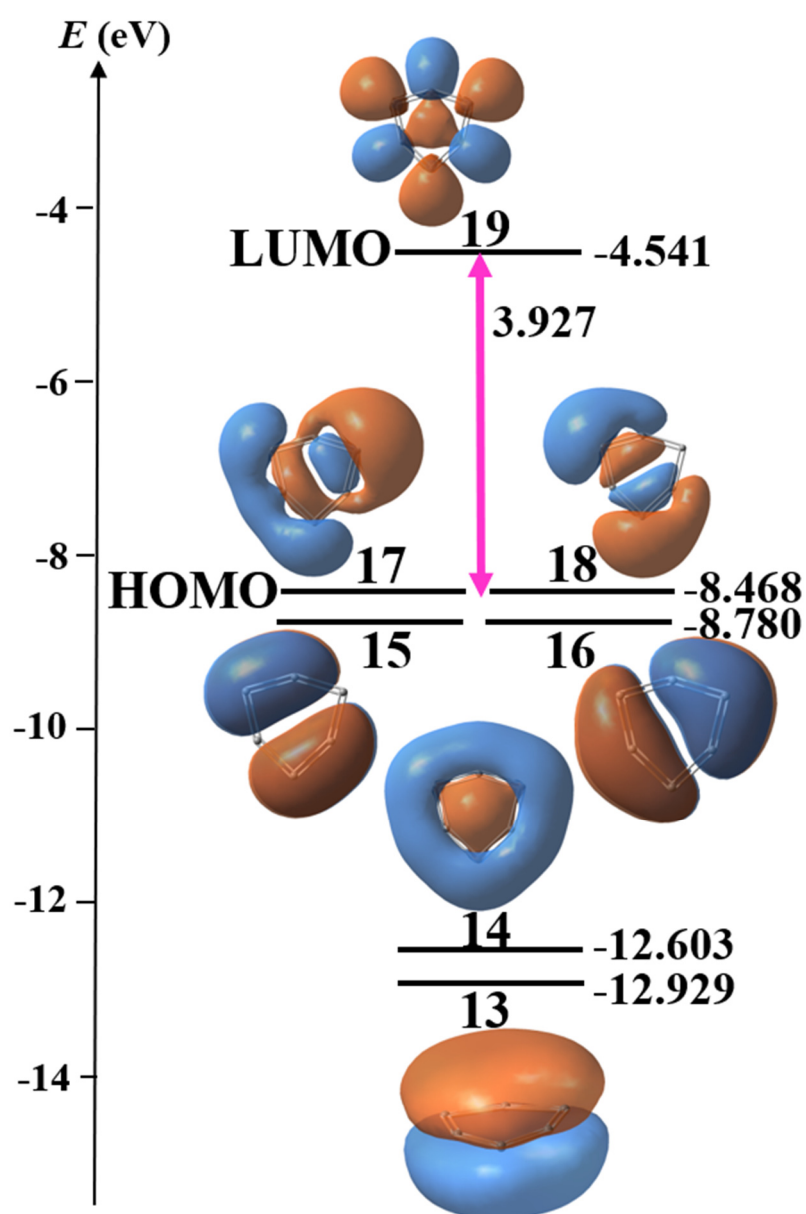


图 S3 C₆ 13-19 号轨道(Isovalue = 0.02 e)及轨道能级图

轨道能以 eV 为单位

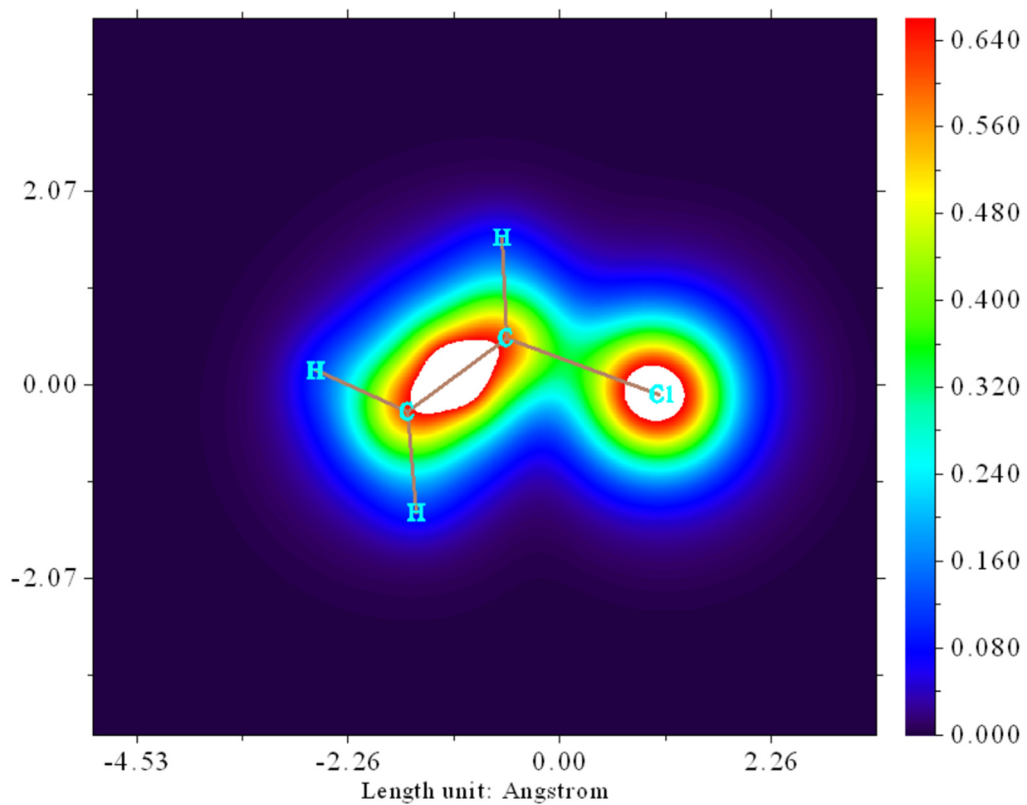


图 S4 在 M062X/def2TZVP 水平上优化结构绘制的氯乙烯 LOL- π 平面填色图

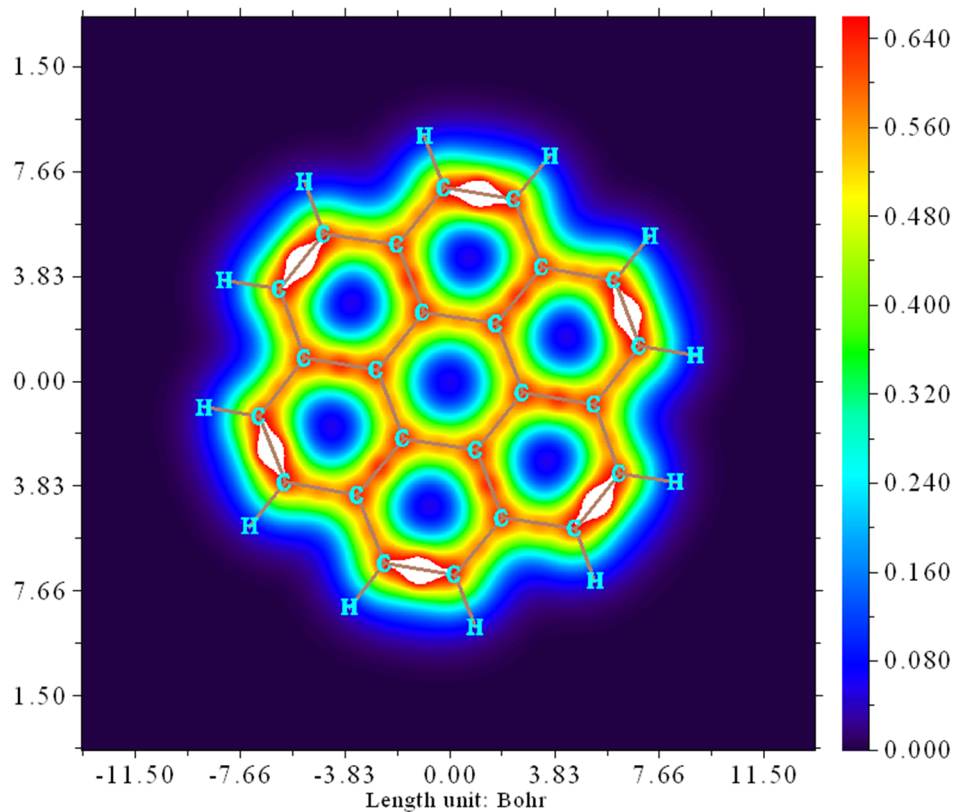


图 S5 基于 M062X/6-31G(d)水平上的优化结构绘制的六苯并苯 LOL- π 平面填色图

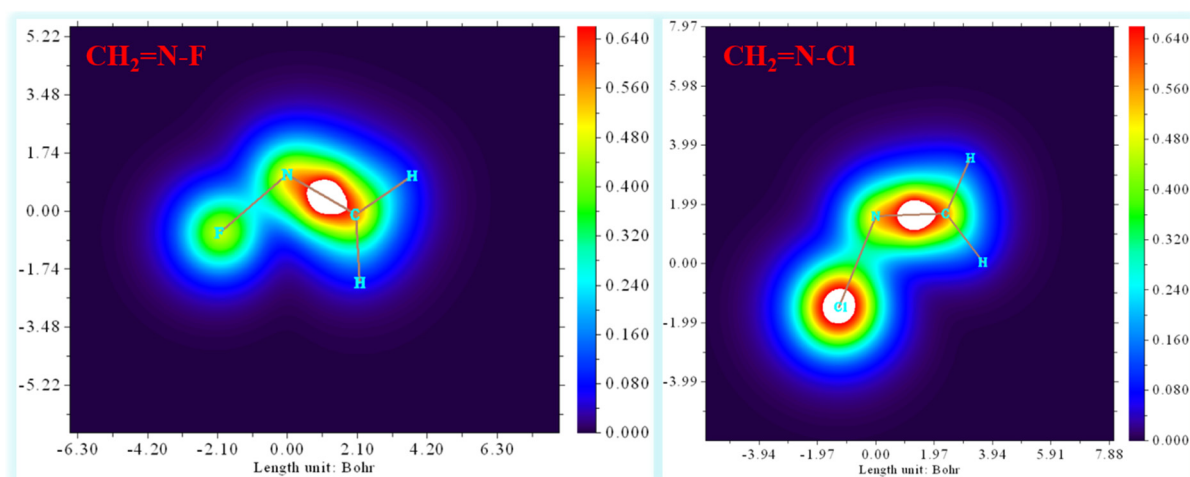


图 S6 平面上方 0.6 Å 距离处 $\text{H}_2\text{C}=\text{N}-\text{F}$ 和 $\text{H}_2\text{C}=\text{N}-\text{Cl}$ 的 $\text{LOL}-\pi$ 平面填色图

填色图的绘制是基于 B3LYP-D3(BJ)/def2-QZVP 水平上的优化结果