

		理想	Li+嵌入-稳态1	无Li-稳态1	Li+嵌入-过渡态03	无Li-过渡态03
(整体) 价数	Li		0.901		0.894	
	H14	0.073	0.082	0.108	0.077	0.099
	C6	0.198	0.186	0.201	0.137	0.193
	甲基6	0.482	0.439	0.471	0.453	0.484
	胺基6	0.327	0.341	0.317	0.335	0.318
	甲胺离子6	0.808	0.780	0.788	0.788	0.802
	Cl6	-0.705	-0.724	-0.683	-0.730	-0.694
bcp电子密度	H14-Li		0.0036		0.0042	
	甲基6-Cl 累加	0.01358	0.0079	0.008	0.026	0.024
	胺基6-Cl 累加	0.06165	0.0856	0.0856	0.0714	0.0713
	甲胺离子6-Cl 累加	0.07523	0.0935	0.0936	0.0975	0.0952

表 1: MASnCl3的bader化合价和bcp电子密度