

研究论文

表面官能化碳纳米管<sup>13</sup>C NMR参数的理论研究

王琳\*

(中国科学院 武汉物理与数学研究所, 湖北 武汉 430071)

收稿日期 2008-9-28 修回日期 2008-11-16 网络版发布日期 2009-6-5 接受日期

**摘要** 碳纳米管表面化学修饰是当前研究的一大热点, 修饰后由于极性基团的存在, 碳纳米管在极性溶液环境中的分散度得到明显改善, 这在很大程度上扩展了纳米管研究的应用范围. 本文采用C<sub>80</sub>H<sub>20</sub>模型来表示(10, 0)碳纳米管, 基于此模型计算了一系列氮烯、卡宾和氟化的单壁纳米管的结构、偶极矩, 以及核磁共振参数. 研究表明高精度的密度泛函理论(DFT)计算能够用来预测纳米管的<sup>13</sup>C化学位移, 理论研究的结果揭示了氮烯、卡宾以及1, 2和1, 4氟化的单壁纳米管的若干<sup>13</sup>C信号特征化学位移值, 为实验NMR谱图的归属提供了一定的依据, 并且可通过与实验相结合来监测表面官能化碳纳米管加成反应是否发生以及确认其加成方式.

**关键词** [核磁共振\(NMR\)](#); [<sup>13</sup>C 化学位移](#); [密度泛函理论计算](#); [碳纳米管](#); [加成反应](#)

**分类号** [O482.53](#) [O641.12](#)

**DOI:**

通讯作者:

王琳 [wanglin@wipm.ac.cn](mailto:wanglin@wipm.ac.cn)

作者个人主页: 王琳\*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(619KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“核磁共振\(NMR\); <sup>13</sup>C 化学位移; 密度泛函理论计算; 碳纳米管; 加成反应”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王琳](#)