

引用信息: LIU Hai-Yang, LENG Ke, HU Jun, YING Xiao, XU Zhi-Guang, CHANG Chi-Kwong. Acta Phys. -Chim. Sin., 2009, 25(04): 694-700 [刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. 物理化学学报, 2009, 25(04): 694-700]

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

A₃型Corrole中位取代基对其 β 位¹H-NMR的影响

刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光

华南理工大学化学系, 广州 510641; 香港科技大学化学系, 香港; 华南理工大学应用物理系, 广州 510641; 华南师范大学化学与环境学院, 广州 510631

摘要:

采用密度泛函(DFT)方法对八个中位有不同取代基的A₃型corrole进行了几何结构优化和核磁共振(NMR)理论计算. 几何优化结果显示5,10,15-三苯基corrole的两个环内NH异构体的中位苯环空间排布方向不同. 此外, 虽然A₃型corrole两个环内NH异构体A和B的能量相差不大, 但A和B分子的Boltzman分布概率却有较大的不同, 且受取代基影响很大. 因而在计算NMR时必须对A和B异构体的理论化学位移做Boltzman统计平均处理. NMR计算结果表明, 在B3LYP/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d,p)水平下可以得到较为合理的corrole的¹H-NMR化学位移结果. β -位氢的化学位移与取代基Hammett常数 σ +P的大小成正比关系. 此外, 由于corrole大环的低对称性, 取代基对不同位置 β -位氢的NMR影响程度不同, 其 β -位氢化学位移的大小和顺序与中位取代基的电子效应和corrole的立体结构因素有关.

关键词: Corrole ¹H核磁共振 规范不变原子轨道 密度泛函理论

收稿日期 2008-11-11 修回日期 2009-01-10 网络版发布日期 2009-02-16

通讯作者: 刘海洋 张启光 Email: chhyliu@scut.edu.cn; chang@ust.hk

本刊中的类似文章

1. 刘海洋; 李立; 应晓; 王湘利; 徐志广; 廖世军; 张启光. 锰(III)5,10,15-三(五氟苯基)-Corrole配合物的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1602-1608

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1425KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ Corrole

▶ ¹H核磁共振

▶ 规范不变原子轨道

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 刘海洋

▶ 冷科

▶ 胡军

▶ 应晓

▶ 徐志广

▶ 张启光