

18-冠醚-6的构象研究

杨捷, 唐作华, 吴德印, 李泽荣, 田安民, 鄢国森

四川联合大学化学系, 成都 610064

摘要:

以柔性大分子18-冠醚-6为研究对象, 将MNDO法所得的三种构象的静电势电荷用于分子力学计算, 得到了三种构象的能量, 同时计算了电负性电荷, 亦将其用于分子力学计算. 将两种计算结果进行比较发现, 有可能将电负性作为分子力学、分子动力学计算的力场参数.

关键词: 分子力学 MNDO;ESP电荷 电负性 构象能 18-冠醚-6

收稿日期 1995-01-05 修回日期 1995-04-06 网络版发布日期 1995-11-15

通讯作者: 田安民 Email:

本刊中的类似文章

1. 张强;张霞;杨忠志.环多肽晶体的浮动电荷极化力场模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1243-1247
2. 王贵昌;孙予罕;钟炳.金属态原子电负性的计算及应用(II)[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 204-209
3. 王瑾玲;郁铭;杨云;缪方明.TTA的席夫反应和分子力学、量化计算 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 389-393
4. 王贵昌;孙予罕;钟炳.金属态原子电负性的计算及应用(I)[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 8-12
5. 赵良仲.氧化物超导电性的经验判据[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 809-812
6. 刘述斌.概念密度泛函理论及近来的一些进展[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 590-600
7. 王俊梅, 赵柱流, 叶学其.分子力学计算的参数化过程[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 424-428
8. 周家驹, 谢桂荣, 谢前, 孙红梅, 冯军, 许志宏.用于结构信息数值化的电负性拓扑指数方法[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 777-780
9. 李军 冯杰 李文英 常海洲 谢克昌.强弱还原煤聚集态对其可溶性影响的分子力学和分子动力学分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2297-2303
10. 余德才;曹文娟;余旭东.原子核强度电势和原子价层电量对元素电负性的标度[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 155-160
11. 张贻亮;李慎敏;杨忠志. β -丙内酯的反应性分析[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 986-989
12. 喻典;陈志达;王繁;李述周.元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 15-22
13. 郭森立;侯廷军;徐筱杰;张斌;朱道本.一个新BEDT-TTF电荷转移盐的晶体结构预测[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 289-91
14. 钱萍;杨忠志.应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇(H_2O)_n (n=11~16)的性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 561-568
15. 吴静;朱敏慧;叶学其.芳基三氮烯类分子的构象和分子轨道研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 134-136
16. 吴冬辉;沈联芳.溶液小分子空间结构的NMR测定——Tranilast在丙酮溶液中的三维结构[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 39-44
17. 刘靖疆;唐继卫;朱能垂;朱敏慧;范小玲.具有麝香气分子的结构特征及其嗅觉模型[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 799-803
18. 胡盛志;陈明旦;刘晓云;周原朗.乙酰丙酮和1-萘甲酸甲酯加成物C₁₇H₁₈O₄的晶体结构和分子力学计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 191-195
19. 胡盛志;黄明生;程贤恩;周原朗.乙酰丙酮光二聚产物C₁₀H₁₆O₄的晶体结构和分子力学计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 196-201
20. 曹晨忠;曾荣今.原子电负性和极化度对卤代甲烷C 1s电子电离能的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1085-1089

扩展功能

本文信息

PDF(987KB)

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

▶ 分子力学

▶ MNDO;ESP电荷

▶ 电负性

▶ 构象能

▶ 18-冠醚-6

本文作者相关文章

▶ 杨捷

▶ 唐作华

▶ 吴德印

▶ 李泽荣

▶ 田安民

▶ 鄢国森

