

吩噻嗪、N-甲基吩噻嗪及其自由基正离子的结构和电子光谱的理论研究

高晓顺,封继康,贾青,刘有成,孙家钟

吉林大学化学系;中国科学技术大学近代化学系;吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用INDO系列方法对吩噻嗪、N-甲基吩噻嗪及其自由基正离子进行了几何构型优化,中性分子为蝶状折叠形,自由基正离子为平面构型。以优化构型为基础,计算了上述四种分子、离子的电荷密度、自旋密度、键序和电子光谱,对光谱进行理论指认的同时,讨论了从中性分子到离子谱带红移的原因。所有理论计算值均与实验值一致。

关键词 [吩噻嗪](#) [电子结构](#) [电荷密度](#) [吩噻嗪 P](#) [电子光谱](#) [自由基](#) [正离子](#) [键序](#) [几何构型优化](#) [其它基金](#) [自旋密度](#)

分类号 [0621.16](#)

A theoretical studies on the structures and electronic spectra of phenothiazine, N-methylphenothiazine and their radical cations

GAO XIAOSHUN,FENG JIKANG,JIA QING,LIU YOUCHENG,SUN JIAZHONG

Abstract The geometries of Phenothiazine, N-Methylphenothiazine and their radical cations have been optimized by using INDO series methods. The neutral molecules are butterfly fold and the radical cations are planar. On the basis of optimized geometries, the charge densities, spin densities, bond orders and electronic spectra of above four molecules and cations have been calculated. The spectra have been assigned theoretically, at the same time, the red shift of spectral band from molecules to cations have been discussed. All calculated results are in good agreement with experimental results.

Key words [PHENOTHIAZINE](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [CHARGE DENSITY](#) [PHENOTHIAZINE P](#) [ELECTRONIC SPECTROSCOPY](#) [FREE RADICALS](#) [BOND ORDER](#) [SPIN DENSITY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(414KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“吩噻嗪”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [高晓顺](#)
- [封继康](#)
- [贾青](#)
- [刘有成](#)
- [孙家钟](#)