

有机磷化合物的研究 72.含磷非对映异构体³¹P NMR 结构效应的分子力学研究

李树森,王国权,李耀和,李英,袁承业

中国科学院上海有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文通过两组含磷非对映异构体³¹P NMR 化学位移的测定和分子力学计算,观察到非对映异构体之间,分子力学计算的磷原子局部Van der Waals相互作用能(E_{VDW-P})是影响其³¹P NMR 化学位移的主要因素,即 E_{VDW-P} 大的异构体, δ_{31P} 在低场, E_{VDW-P} 小的, δ_{31P} 在高场.

这一结果对利用非对映异构体中某核的NMR 化学位移的实验测定,结合分子力学计算的该核的局部Van der Waals相互作用能,建立一种简便的确定非对映异构体中未知不对称中心的绝对构型的新方法,具有一定的理论意义和实用价值

关键词 [有机磷化合物](#) [加成反应](#) [席夫碱](#) [亚胺](#) [绝对构型](#) [磷31核磁共振谱法](#) [分子力学](#) [不对称反应](#) [非对映异构体](#) [不对称中心](#) [亚磷酸二酯](#)

分类号 [0627](#) [0621.16](#)

Studies on organophosphorus compounds.72.a molecular mechanics study of the structure effect of phosphorus-based diastereoisomers on the ³¹P NMR chemical shift

LI SHUSEN,WANG GUOQUAN,LI YAOHE,LI YING,YUAN CHENGYE

Abstract The structural influence of two series of phosphorus-based diastereoisomers, e.g. a-aminobenzylphosphonates I and II (R = alkyl, Ph), on the ³¹P NMR chem. shift is evaluated by mol. mechanics calculation The results reveal that the intramol. local Van der Waals interaction energy of phosphorus atom (E_{VDW-P}) calculated by MM2(85) program is the predominating factor governing the magnitude of the chem. shift of the phosphorus nucleus. The isomer, which has relative large E_{VDW-P} value will show downfield ³¹P NMR chem. shift or vice versa. This empirical approach provides the experimental basis of a new and facile method for the elucidation of the absolute configuration of diastereoisomers with any asym. center. It has, therefore, significant theor. importance and potential practical value.

Key words [ORGANO PHOSPHORUS COMPOUNDS](#) [ADDITION REACTION](#) [SCHIFF BASE](#) [IMINE](#) [ABSOLUTE CONFIGURATION](#) [PHOSPHORUS 31 MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [MOLECULAR MECHANICS](#) [DIASTEREOISOMERIDE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“有机磷化合物” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [李树森](#)
- [王国权](#)
- [李耀和](#)
- [李英](#)
- [袁承业](#)