

论文

对甲氧基苯甲醛肟晶体结构、 红外光谱及分子间相互作用的实验与理论研究

林宪杰¹, 徐为人^{1,2}, 王建武¹, 刘成卜¹

1. 山东大学化学与化工学院, 济南 250100; 2. 天津药物研究院, 天津 300193

摘要:

从实验和理论两个方面研究了Z型和E型对甲氧基苯甲醛肟晶体的熔点、 结构、 红外光谱和分子间相互作用. 在E型和Z型晶体中, 对甲氧基苯甲醛肟分子分别呈二聚体重单元和双链Zigzag结构排列. 研究表明, 电荷分布变化引起的静电相互作用差别、 形成氢键的方式和强度以及晶体中分子排列方式导致的范德华作用不同是造成Z型和E型对甲氧基苯甲醛肟固体熔点、 红外光谱等物理性质差别的根本原因.

关键词: 对甲氧基苯甲醛肟; 分子间相互作用; 实验; 从头算方法

Experimental and Theoretical Studies on the Structures, IR Spectrum and Inter-molecular Interaction of p-Methoxybenzaloxime

LIN Xian-Jie¹, XU Wei-Ren^{1,2}, WANG Jian-Wu¹, LIU Cheng-Bu^{1*}

1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China;
2. Tianjin Institute of Pharmaceutical Research, Tianjin 300193, China

Abstract:

The melting point, crystal structure, IR spectrum and inter-molecular interaction of Z and E p-methoxybenzaloxime were studied by experiment and ab initio method. There exists obvious difference in physical properties including melting point, crystal structure and IR spectrum between Z and E p-methoxybenzaloxime. The double zigzag chain and the repeated unit, dimmer, were found in Z and E p-methoxybenzaloxime crystal respectively. It is shown that the type of crystal, the intensity of H-bond and the distribution of charge are the essential factors resulting in the abnormality of the melting point and IR spectrum of p-methoxybenzaloxime.

Keywords: p-Methoxybenzaloxime; Inter-molecular interaction; Experiment; Ab initio method

收稿日期 1900-01-01 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 刘成卜

作者简介:

参考文献:

林宪杰,徐为人,王建武,刘成卜.对甲氧基苯甲醛肟晶体结构、 红外光谱及分子间相互作用的实验与理论研究.高等

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (284KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

对甲氧基苯甲醛肟; 分子间相互作用; 实验; 从头算方法

本文作者相关文章

林宪杰

徐为人

王建武

刘成卜

林宪杰

徐为人

王建武

刘成卜

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					Snow ugg cardy c boots
					The entire Scooby import o hair she clothing production
