

TTA的席夫反应和分子力学、量化计算

王瑾玲; 郁铭; 杨云; 缪方明

天津师范大学晶体化学研究所, 天津 300074; 天津轻工业学院, 天津 300222

摘要:

报导了噻吩甲酰三氟丙酮(TTA)与4-氨基安替比林(4-ATP)缩合反应生成的两个席夫碱化合物A和C, 利用分子力学和分子动力学方法研究了该缩合反应可能生成的三个席夫碱化合物A、B和C的各种构象. 从TTA的量化计算结果可以看出缩合反应生成的两个席夫碱化合物A和C是正确的.

关键词: 席夫碱 席夫反应 分子力学计算 量化计算 机理分析

收稿日期 2001-09-06 修回日期 2001-11-21 网络版发布日期 2002-05-15

通讯作者: 王瑾玲 Email: wangjinling43@eyou.com

本刊中的类似文章

1. 张平; 胡小莉; 陈德余. 铜(II)蛋氨酸席夫碱配合物EPR波谱研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 73-77
2. 李银玲; 王凤奇; 甄珍; 张建成; 刘新厚. 水杨叉缩苯胺及其衍生物的变色机理[J]. 物理化学学报, 1998, 14(11): 981-987
3. 于微; 李远刚; 王天宇; 刘鸣华; 李占双. 溶剂和分子结构对席夫碱分子在有机凝胶中的荧光增强和超分子手性的影响[J]. 物理化学学报, 2008, 24(09): 1535-1539
4. 章慧; 陈渊川; 王芳; 邱晓明; 李丽; 陈坚固. 固体CD光谱研究及其应用于手性席夫碱M(II)配合物[J]. 物理化学学报, 2006, 22(06): 666-671
5. 蔡俊放; 刘鸣华; 李津如; 江龙. 无长链席夫碱衍生物单分子膜和LB膜[J]. 物理化学学报, 2000, 16(07): 583-586
6. 王宁; 丁克强; 童汝亭; 邵会波. 席夫碱自组装单分子膜的电化学行为[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 846-849
7. 史卫良; 陈德余. 水杨醛酪氨酸铜配合物合成和EPR波谱 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(02): 181-184

扩展功能

本文信息

PDF(1639KB)

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

▶ 席夫碱

▶ 席夫反应

▶ 分子力学计算

▶ 量化计算

▶ 机理分析

本文作者相关文章

▶ 王瑾玲

▶ 郁铭

▶ 杨云

▶ 缪方明