

环双(对-蒽基-对草快)的分子识别与谱学性质

王维 邵世群 周慧 滕启文

浙江大学化学系, 杭州 310027; 浙江树人大学生物与环境工程学院, 杭州 310015

摘要:

环双(对-蒽基-对草快)是一种新型的缺电子大环仿生主体, 分子识别是其最重要的应用之一. 考察主体对一系列客体分子如水、氨、醇及杂环等的识别能力, 用密度泛函理论(DFT)中的B3LYP/3-21G基组对主客体复合物的结构进行优化. 在B3LYP/6-31G(d)水平上进行单点能计算, 校正后得到复合物的结合能. 用B3LYP/3-21G方法计算¹³C和³He化学位移. 结果表明, 主体对客体分子的识别主要靠客体上的杂原子与主体上的氢原子之间的氢键进行. 复合物的稳定化能受氢键的数目和距离影响. 氢键的形成导致部分复合物LUMO与HOMO能隙增大, 同时导致与氢键相连的C—H键上C原子的化学位移向低场移动. 复合物的芳香性与其结合能的大小及结合方式有关. 主体的芳香性因其与客体之间的弱相互作用而提高, 但太强的相互作用及客体在主体空腔内都将影响主体的环电流, 从而削弱其芳香性.

关键词: 环双(对-蒽基-对草快) 分子识别 化学位移 芳香性

收稿日期 2008-04-30 修回日期 2008-06-10 网络版发布日期 2008-07-18

通讯作者: 滕启文 Email: wushi@zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(548KB\)](#)

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

▶ 环双(对-蒽基-对草快)

▶ 分子识别

▶ 化学位移

▶ 芳香性

本文作者相关文章

▶ 王维

▶ 邵世群

▶ 周慧

▶ 滕启文