

光谱学与光谱分析

几种取代苯硫酚分子结构与振动光谱的理论研究

刘怀成¹, 程建波^{1*}, 李文佐¹, 赵冰²

1. 烟台大学化学生物理工学院, 山东 烟台 264005
2. 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 吉林 长春 130012

收稿日期 2009-6-10 修回日期 2009-9-20 网络版发布日期 2010-2-1

摘要 采用密度泛函理论(density functional theory, DFT)中的杂化密度泛函B3LYP方法, 在6-311++G**基组水平上对几种取代苯硫酚分子的构型进行了几何优化, 得出了它们的最稳定构型并对其能级差、核独立化学位移、极化率和振动光谱进行了理论计算。研究表明, 4-巯基吡啶(4-MPY)、4-巯基苯甲酸(4-MBA)和4-巯基苯胺(PATP)均为平面构型, 1,4对巯基苯(BDT)中S-H键与苯环平面的夹角为20.2°, 4-甲基巯基苯(4-MBT)中S-H键与苯环平面的夹角为39.6°。几种分子都具有很强的芳香性和较大的极化率值。5种分子的极化率张量平均值大小顺序为BDT>4-MBT>4-MBA>4-MPY>PATP, 极化率的各向异性不变量变化趋势为4-MBA>4-MBT>BDT>PATP>4-MPY。

关键词 [振动光谱](#) [核独立化学位移](#) [极化率](#) [密度泛函理论](#)

分类号 [O641](#)

DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2010)02-0368-04

通讯作者:

程建波 jbcheng@ytu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1322KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“振动光谱”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘怀成](#)

· [程建波](#)

· [李文佐](#)

· [赵冰](#)