

Full Papers

1,3-二甲基-2-二茂铁甲基苯并咪唑碘盐的合成、表征、晶体结构及量子化学计算

张晶, 杨秉勤*, 朱海燕, 李涛, 文振翼

西北大学化学系, 西安710069

收稿日期 2005-8-3 修回日期 2006-1-10 网络版发布日期 接受日期

摘要 合成了一种新型菁染料中间体1,3-二甲基-2-二茂铁甲基苯并咪唑碘盐, 通过元素分析、MS、¹H NMR及IR对其进行了表征, 并采用X-衍射方法测定了该化合物的晶体结构。其属于单斜晶系, 空间群P2(1)/c。依据晶体结构使用Gaussian03程序对模型进行了量子化学计算, 采取量子化学密度泛函B3LYP/6 31 G方法对该化合物进行了几何全优化, 对其结构、稳定性、前沿轨道布居以及原子净电荷分布进行了讨论。

关键词 [1,3-二甲基-2-二茂铁甲基苯并咪唑碘盐,合成,晶体结构,量子化学计算](#)

分类号

1,3-二甲基-2-二茂铁甲基苯并咪唑碘盐, 合成, 晶体结构, 量子化学计算

ZHANG Jing, YANG Bing-Qin*, ZHU Hai-Yan, LI Tao, WEN Zhen-Yi

Department of Chemistry, Northwest University, Xi'an, Shaanxi 710069, China

Abstract A novel benzimidazole derivative, 1,3-dimethyl-2-ferrocenylmethylbenzimidazolium iodide (**1**) was synthesized and characterized by elemental analysis, MS, ¹H NMR and IR spectra. Its crystal structure was determined by X-ray single crystal diffraction, and the title compound belongs to monoclinic system with space group P2(1)/c. According to the crystal structure, the quantum chemistry calculation was performed by Gaussian 03 program, and full geometry optimizations of the title compound were carried out with DFT method at B3LYP/6-31G level. Its structure, stability, frontier molecular orbital components and net charge distribution were discussed.

Key words [1,3-dimethyl-2-ferrocenylmethylbenzimidazolium synthesis crystal structure quantum chemical calculation](#)

DOI:

通讯作者 杨秉勤 yangbq@nwu.edu.cn

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“1,3-二甲基-2-二茂铁甲基苯并咪唑碘盐,合成,晶体结构,量子化学计算”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [张晶](#)
- [杨秉勤](#)