

N,N-二(8-羟基-5-喹啉甲基)甘氨酸乙酯的量子化学研揪

Studies on N,N-bis(8-hydroxy-5-quinolinemethyl) glycine ethylester in quantum chemistry

摘要点击 4 全文点击 1 投稿时间: 2001-3-21 最后修改时间: 2001-7-1

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

DOI编号 1000-0364(2001)18-305-3

中文关键词 [N,N-二\(8-羟基-5-喹啉甲基\)甘氨酸乙酯](#) [半经验方法](#) [几何构型](#) [电子结构](#) [振动频率](#)

英文关键词

基金项目 高等学校博士点专项基金资助课题(批准号:9500303)

作者	单位	E-mail
陈林红	清华大学物理系天体物理中心,北京 100084	
桑斌	清华大学物理系天体物理中心,北京 100084	
牛金芳	清华大学图书馆,北京 100084	
项金根	清华大学物理系天体物理中心,北京 100084	
尚仁成	清华大学物理系天体物理中心,北京 100084	

中文摘要

运用分子轨道理论中的半经验AM1、PM3方法和Hartree-Fock从头算方法,通过能量梯度全优化率先计算了新近合成的化合物N,N-二(8-羟基-5-喹啉甲基)甘氨酸乙酯的平衡几何构型、电子结构以及生成热、偶极矩等分子基本性质,并联系经典有机电子结构理论进行讨论.三种方法得到的结构参数基本一致,和实验测量的晶体结构符合较好.在稳定构型基础上,用AM1方法进行正则振动频率分析,得到C-C双键、C-N单双键、C-O单双键和羟基OH的振动基频,和实验测得的红外光谱特征峰吻合较好.

英文摘要

您是第 85072 位访客

版权所有 © 2006《原子与分子物理学报》编辑部

通讯地址:四川省成都市武侯区四川大学收发服务中心378号信箱 邮编:610065

电话:(028)85405516 传真:(028)85405516 E-mail:zyyf@chinajournal.net.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计