引用信息: LIN Ying-Wu; WANG Zhong-Hua; NIE Chang-Ming; NI Feng-Yun. Acta Phys. - Chim. Sin., 2007, 23(10): 1594-1598 [林英武; 王中华; 聂长明; 倪峰云. 物理化学学报, 2007, 23

(10): 1594-1598]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 研究论文

取代基对卟吩结构和性质的影响

林英武; 王中华; 聂长明; 倪峰云

南华大学化学化工学院,湖南 衡阳 421001; 复旦大学化学系,上海 200433

摘要:

运用密度泛函理论(DFT) B3LYP/6-31G(d, p)方法, 对卟吩及其被取代基— $CH=CH_2$ 、— $COCH_3$ 、— $CHOHCH_3$ 、— $CHNH_2CH_3$ 或— $CHSHCH_3$ 所修饰后的分子构型进行了优化. 同时, 对其电子吸收光谱与核磁共振 氢谱也进行了量化计算. 结果表明, 这些取代基有着各自不同的空间构象, 对卟吩环的整体结构没有很大的扰动. 然而, 它们重新调整了卟吩环中原子电荷的分布, 改变了前线分子轨道(LUMO-HOMO)能隙, 结果导致卟吩的吸收光谱与  $^1$ H NMR均发生了相应的改变.

关键词: 卟吩 取代基 密度泛函理论 吸收光谱 核磁共振氢谱

收稿日期 2007-04-05 修回日期 2007-05-17 网络版发布日期 2007-07-03

通讯作者: 林英武 Email: linlinying@hotmail.com

# 本刊中的类似文章

1. 李丽霞; 刘传朴; 胡永峰; 顾月姝; 印永嘉; 屈松生. 四苯基卟吩化合物的表面增强喇曼散射[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 243-246

Copyright © 物理化学学报

# 扩展功能

#### 本文信息

## PDF(876KB)

### 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

- ▶卟吩
- ▶ 取代基
- ▶ 密度泛函理论
- ▶吸收光谱
- ▶ 核磁共振氢谱

## 本文作者相关文章

- ▶ 林英武
- ▶ 王中华
- ▶ 聂长明
- ▶ 倪峰云