

研究论文

取代基对吡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, 对吡吩及其被取代基—CH=CH₂、—COCH₃、—CHOHCH₃、—CHNH₂CH₃或—CHSHCH₃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, 对吡吩环的整体结构没有很大的扰动. 然而, 它们重新调整了吡吩环中原子电荷的分布, 改变了前线分子轨道(LUMO-HOMO)能隙, 结果导致吡吩的吸收光谱与¹H NMR均发生了相应的改变.

关键词: 吡吩 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: linlinyong@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. 四苯基吡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

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

- ▶ 吡吩
- ▶ 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