

## 研究论文

### 钉联吡啶单配体双取代基效应

郑康成; 匡代彬; 沈勇; 王菊平

中山大学化学与化学工程学院, 广州 510275

#### 摘要:

对钉联吡啶配合物及其单配体的4,4' 双取代衍生物, 用量子化学密度泛函(DFT)方法在B3LYP/LanL2DZ水平上进行计算. 探讨一些强的推电子基团(如-OCH<sub>3</sub>)和强的拉电子基团(如-NO<sub>2</sub>)的取代基效应对配合物的电子结构与相关性质, 如配位键长、光谱性质等的影响规律, 为该类配合物的合成, 光、电、催化和生化作用机理分析提供理论参考.

关键词: 2,2'-联吡啶衍生物 钉(II)联吡啶配合物 光化学 电化学 密度泛函法

收稿日期 2000-05-11 修回日期 2000-07-24 网络版发布日期 2001-01-15

通讯作者: 郑康成 Email: ceszkc@zsu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1451KB)

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

▶ 2,2'-联吡啶衍生物

▶ 钉(II)联吡啶配合物

▶ 光化学

▶ 电化学

▶ 密度泛函法

本文作者相关文章

▶ 郑康成

▶ 匡代彬

▶ 沈勇

▶ 王菊平