

# 几种膦铑络合物及其 MAC 络合物的量子化学计算

陈秀敏<sup>1</sup>, 李西平<sup>1</sup>, 刘有德<sup>2</sup>

(1. 昆明理工大学 理学院, 云南 昆明 650093 2. 云南师范大学, 云南 昆明 650092)

**摘要:** 采用从头计算方法(HF)对几种膦铑络合物  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}) - \text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}) - \text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  及它们与乙基- $\alpha$ -乙酰胺基肉桂酸(MAC)结合形成的中间体  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R} - \text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S} - \text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  的几何结构进行了优化, 计算结果显示:(1)采用从头计算方法对含有膦铑络合物的较大催化体系的全优化计算是可行的;(2)分子构型不同的双膦配体及其所形成的膦铑络合物中大部分主要原子间的键长、键角数据相差不大, 但手性的不同对膦铑络合物的部分键长、键角数据有所影响;(3)在与(MAC)形成络合物前后, 双膦配体上主要原子的电荷分布变化并不显著, 但金属铑原子上的电荷则显著增加, 可能是 MAC 在与膦铑配体络合过程中有电荷向铑原子上进行了转移。

**关键词:** 膦铑催化剂; 催化氢化; HF

中图分类号: O646.121 文献标识码: A 文章编号: 1007-855X(2004)03-0146-06

## A Quantum Chemistry Calculation of the Rh(I) - Methyl - $\alpha$ - Acetamidocinnamate

### Complexes with Diphosphine Ligands

CHEN Xiu-min<sup>1</sup>, LI Xi-ping<sup>1</sup>, LIU You-de<sup>2</sup>

(1. Faculty of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China;

2. Yunnan Normal University, Kunming 650092, China)

**Abstract:** A theoretical study on Rh(I) - methyl -  $\alpha$  - acetamidocinnamate complexes with diphosphine ligands is presented. The geometrical optimizations are performed at the ab initio level, and the geometry optimized results indicate: (1) quantum chemical method can be used in the optimization of the intermediates of this kind of reactions; (2) There are no significant differences in the long distances and bond angle among the Rh(I) - methyl -  $\alpha$  - acetamidocinnamate complexes with different diphosphine ligands, but the bond angle may be affected by the chiral of the diphosphine ligands; (3) There are no significant changes in the charge on the main atoms of diphosphine ligands after becoming the complexes with MAC, but the charge on the Rh increases, which may transfer from the MAC.

**Key words:** Rh(I) complexes with diphosphine ligands; Catalytic hydrogenation; HF

## 0 引言

在过去 30 年中, 利用手性催化剂, 由潜手性烯类底物的不对称氢化合成具有高光学纯度的化合物, 是令人印象最为深刻的成就之一, 而由过渡金属络合物催化的烯酰胺的均相不对称氢化是合成光学活性  $\alpha$ -氨基酸类化合物的一种最有力的方法. 由铑络合物催化的不对称氢化在氨基酸及有关化合物的合成中已获得高对映选择性. 近年来, 在这一领域的实验研究取得了较大的进展, 尤其是使用含有螯合双膦配体的络合物, 使氨基酸衍生物在催化氢化中获得了接近 100% 的对映体过量(%e.e)的高光学产率<sup>[1]</sup>. 因此, 弄清不对称催化氢化反应的机理, 对寻找和合成更有效的催化剂是很有意义的. 但由于反应中间体的不稳

收稿日期: 2003-09-15. 基金项目: 云南省自然科学基金(项目编号: B002M), 云南省教育厅科学研究基金(项目编号: 0111058).

第一作者简介: 陈秀敏(1973-), 女, 工程师. 主要研究方向: 量子化学. E-mail: chenxiumin9@hotmail.com

定性,使得通过实验方法获得所有反应中间体以对反应机理进行研究极其困难.而采用量子化学方法可以极为方便地对反应中间态进行优化;对能量和电子构型等方面进行计算,从而对该类反应的反应机理进行探讨.这方面的研究报道如:Clark R. Landis 等人用 ONIOM 方法对  $[\text{Rh}(\text{DuPHOS})]^+$  的催化氢化反应机理的研究<sup>[2]</sup>,Achim Kless 等人用 *ab initio* 方法对具有配位磷的铑(I)络合物催化 N 链烯酰胺氢化机理的研究<sup>[3]</sup>等,但由于该类反应体系原子数较多,目前多数理论计算均采用将双膦配体中的部份苯环用甲基取代<sup>[3]</sup>或是采用分层计算(ONIOM 方法),即对反应体系中涉及成键或键的断裂的原子采用精度较高的计算方法(如:B3LYP, HF, MP2 等),而对反应体系中不涉及成键或键的断裂的原子采用精度较低的计算方法(如:UFF, AM1 等)<sup>[2]</sup>.

为使对膦铑络合物及其甲基- $\alpha$ -乙酰胺基肉桂酸络合物的量子化学研究更具普遍性,采用从头计算方法(HF)对不同手性的膦铑络合物  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}) - \text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}) - \text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  及它们与乙基- $\alpha$ -乙酰胺基肉桂酸(MAC)结合形成的中间体  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R} - \text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S} - \text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  的几何结构进行了优化,得到了对这几种膦配体及它们与(MAC)结合形成的中间体的几何构型和电子结构.目前尚未见此项工作的研究报道.

## 1 计算方法

在对三种双膦配体及它们与氨基酸衍生物所形成的络合物的优化计算均在 HF 理论水平上进行,由于计算所涉及的体系原子较多,因而对 H, O, P, N, C 等原子均采用 STO-3G,考虑到过渡金属 Rh 的存在,其相对论效应及电子相关效应较为显著,对 Rh 采用了 lanl2 赝势及 lanl2dz 基组.全部计算均使用 GAUSSIAN98 程序在 PIV 微机上进行.结构图的绘制使用 MOLEKEL4.3 程序<sup>[4]</sup>,在绘制结构图时,因原子较多,为便于清楚地描绘出结构关系,后三个图(图 5,图 6,图 7)中的氢原子均未画出.

## 2 计算结果

### 2.1 $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}) - \text{DIPAMP}]^+$ , $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}) - \text{CHIRAPHOS}]^+$ , $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$ 的几何构型优化结果

图 1 绘出了 3 种不同配体的结构式,其中(R,R)-DIPAMP 的手性由与磷原子相连的苯环上的甲氧基所体现;(S,S)-CHIRAPHOS 的手性由与碳原子相连的甲基所体现;DIPHOS 则不具有手性.

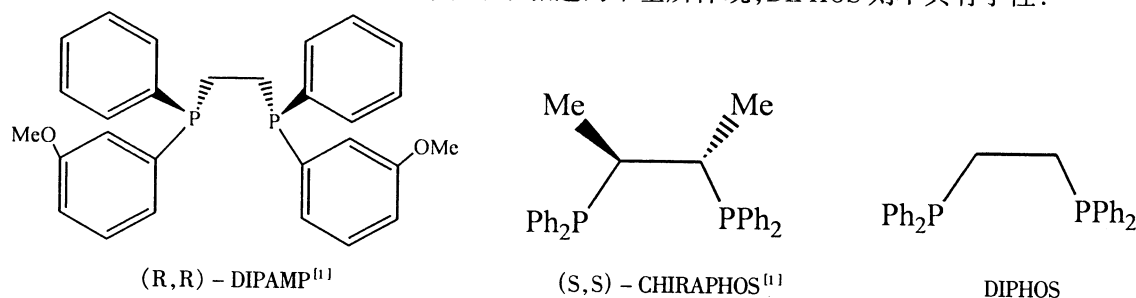
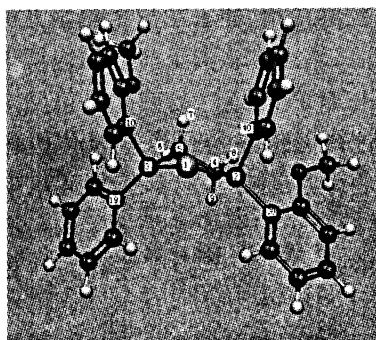
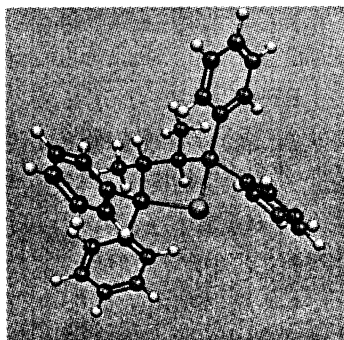
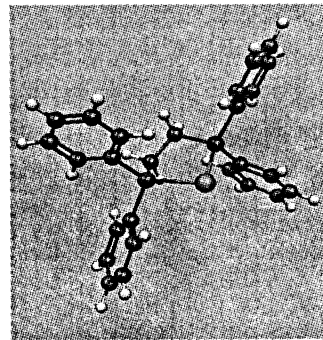


图 1 (R,R)-DIPAMP, (S,S)-CHIRAPHOS, DIPHOS 的分子结构式

$[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}) - \text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}) - \text{CHIRAPHOS}]^+$  是两种重要的手性膦铑催化剂,它们催化氢化甲基- $\alpha$ -乙酰胺基肉桂酸的生成物的 %e.e 值均大于 95%,对这两个手性配体以及非手性双膦配体  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  的几何结构进行了全优化,优化得到的几何构型绘于图 2,图 3 和图 4,主要键长和键角的计算结果列于表 1,表 2.对非手性双膦配体  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  的计算主要起对照作用.

图中标出的原子序号在表 1、表 2 中用于表示相应的键长、键角,1 为铑,2,3 为磷,6,7,8,9 为氢,其余为碳.图 3、图 4 的序号与图 2 同,略去未标.

图2  $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$  结构图图3  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$  结构图图4  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  结构图表1  $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  的几何构型优化结果主要键长(nm)数据

键	$[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$	$[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$
R(1-2)	2.339	2.392	2.384
R(1-3)	2.310	2.310	2.384
R(2-4)	1.840	1.870	1.840
R(3-5)	1.850	1.850	1.840
R(4-5)	1.550	1.560	1.540
R(3-10)	1.810	1.810	1.820
R(3-19)	1.810	1.820	1.820
R(2-30)	1.810	1.820	1.820
R(2-40)	1.810	1.820	1.820
R(4-6)	1.080	1.540	1.080
R(4-7)	1.080	1.080	1.080
R(4-8)	1.080	1.540	1.080
R(4-9)	1.080	1.080	1.080

表2  $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  的几何构型优化结果中的主要键角( $^\circ$ )数据

键角	$[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$	$[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$
A(3-1-2)	86.827	85.080	85.200
A(1-3-5)	102.950	105.580	106.950
A(3-5-4)	111.450	108.510	111.900
A(5-4-2)	113.070	111.510	110.730
A(4-2-1)	106.640	106.450	105.090
A(30-2-40)	109.960	106.250	107.100
A(10-3-19)	110.330	110.140	107.140

计算结果显示,虽然 $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  中的双膦配体分子结构和手性不同,但优化得到的 $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  的分子构型的大部分主要键长、键角的数据仍十分相近.其中少部分键角数据相差稍大,认为是空间排斥作用或手性差异所致,如 $[\text{Rh}(\text{R,R})-\text{DIPAMP}]^+$  中的 A(5-4-2), A(30-2-40) 与  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  中的略有差别可能是因其苯环上的甲氧基使其比后两者在双膦位置上有更大的空间排斥作用从而键角有所不同.  $[\text{Rh}(\text{S,S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$  中的 A(3-5-4) 与另外两者有所不同则可能是因其手性碳上的甲基所致.

## 2.2 $[\text{Rh}(\text{R,R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ , $[\text{Rh}(\text{S,S}-\text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ , $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$ 的几何构型优化结果

在手性膦铑催化剂催化氢化甲基- $\alpha$ -乙酰胺基肉桂酸氢化反应中,  $[\text{Rh}(\text{R,R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,

$[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$  是重要的中间态. 其构型为变形的平面四边形. 优化结果支持该理论的结论. 图 4, 图 5, 图 6 分别绘出  $[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$  和  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  优化得到的结构图, 表 4, 表 5 分别列出优化得到的各络合物的键长, 键角值.

图中标出的原子序号在表 3, 表 4 中用于表示相应的键长、键角, 1 为铑, 2, 3 为磷, 4, 65, 66 为氧, 8 为氮, 其余为碳. 图 6, 图 7 的序号与图 5 同, 略去未标.

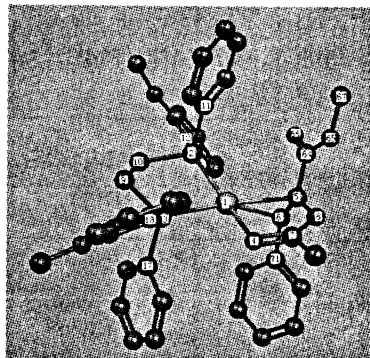


图 5  $[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$  结构图

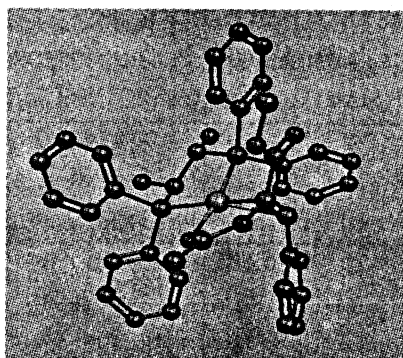


图 6  $[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$  结构图

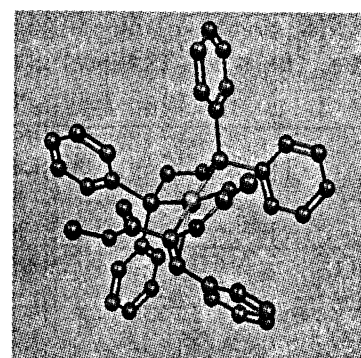


图 7  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  结构图

表 3  $[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  
 $[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,  
 $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  的几何构  
型优化结果主要键长 (nm) 数据

键	$[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$
R(1-3)	2.419	2.414	2.425
R(1-2)	2.470	2.450	2.470
R(2-10)	1.850	1.870	1.843
R(9-10)	1.540	1.550	1.540
R(3-9)	1.840	1.860	1.850
R(1-4)	2.100	2.100	2.090
R(1-5)	2.410	2.400	2.420
R(1-6)	2.420	2.410	2.410
R(2-12)	1.820	1.830	1.820
R(2-11)	1.830	1.830	1.820
R(3-18)	1.820	1.830	1.820
R(3-17)	1.820	1.820	1.820
R(5-6)	1.370	1.370	1.370
R(4-7)	1.250	1.250	1.250
R(7-8)	1.380	1.380	1.380
R(8-5)	1.450	1.450	1.450
R(5-64)	1.530	1.530	1.530
R(64-66)	1.210	1.210	1.210
R(64-65)	1.380	1.380	1.380
R(65-67)	1.430	1.430	1.440
R(6-71)	1.500	1.490	1.490
R(6-72)	1.080	1.080	1.080

表 4  $[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  
 $[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,  
 $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  的几何构  
型优化结果中的主要键角数据

键角	$[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$
A(2-1-3)	83.17	83.647	83.41
A(1-3-9)	110.93	108.17	105.60
A(3-9-10)	113.15	111.05	110.24
A(9-10-12)	115.9	112.80	113.04
A(10-2-1)	107.07	107.50	106.3
A(1-4-7)	117.74	117.43	118.71
A(3-1-4)	89.56	90.5	89.75
A(2-1-5)	110.65	109.66	110.79
A(2-1-6)	102.81	93.78	97.05
A(4-1-5)	75.82	76.00	76.09
A(4-1-6)	89.18	91.02	92.558
A(4-7-8)	121.23	121.26	121.14
A(7-8-5)	120.60	120.55	120.82
A(5-6-71)	128.18	129.64	129.40
A(5-6-72)	114.86	114.75	115.13
A(1-3-17)	105.36	110.95	117.33
A(1-3-18)	120.65	116.34	118.12
A(1-2-12)	128.64	117.24	119.17
A(1-2-11)	104.91	113.78	113.26
A(12-2-11)	106.02	107.29	106.77
A(17-3-18)	106.22	105.91	105.54

从计算结果可看出, 优化得到的  $[\text{Rh}(\text{R,R-DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S,S-CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,

$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  的分子构型的大部分主要键长、键角的数据十分相近,少部分键角数据如  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$  中的 A(2-1-6), A(4-1-6), A(1-3-17), A(1-3-18), A(1-2-12), A(1-2-11) 与  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$  中的略有差别同样可能是因为其苯环上的甲氧基使其比后两者在双磷位置上有更大的空间排斥作用从而键角有所不同.

表 5 列出的是三种磷铑络合物与其 MAC 络合物中主要原子电荷值的比较. 其中 O(4), C(5), C(6), C(7), N(8), O(65), O(66), C(64), C(71), C(67) 等原子为 MAC 上的主要原子.

表 5  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R})-\text{DIPAMP}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}-\text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$ ,  $[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$  中主要原子上的电荷分布

原子	$[\text{Rh}(\text{R}, \text{R})-\text{DIPAMP}]^+$	$[\text{Rh}(\text{S}, \text{S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})]^+$	$[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}-\text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$	$[\text{Rh}(\text{DIPHOS})(\text{MAC})]^+$
Rh(1)	-0.740	-0.631	-0.522	-0.981	-0.986	-0.976
P(2)	0.807	0.796	0.803	0.800	0.784	0.794
P(3)	0.794	0.776	0.802	0.803	0.787	0.798
O(4)				-0.171	-0.168	-0.167
C(5)				0.117	0.112	0.114
C(6)				0.014	0.021	0.019
C(7)				0.390	0.390	0.389
N(8)				-0.340	-0.339	-0.339
C(9)	-0.227	-0.144	-0.229	-0.237	-0.149	-0.233
C(10)	-0.225	-0.141	-0.230	-0.233	-0.149	-0.234
C(11)	-0.118	-0.136	-0.130	-0.119	-0.137	-0.139
C(12)	-0.143	-0.139	-0.142	-0.162	-0.136	-0.139
C(17)	-0.100	-0.105	-0.133	-0.113	-0.129	-0.131
C(18)	-0.164	-0.141	-0.142	-0.160	-0.140	-0.145
O(65)				-0.249	-0.249	-0.247
O(66)				-0.236	-0.238	-0.238
C(67)				-0.062	-0.062	-0.062
C(64)				0.339	0.337	0.332
C(71)				0.019	0.021	0.023

上表显示,在与(MAC)形成络合物前后,双磷配体上除 Rh 以外主要原子的电荷分布变化并不显著,但金属铑原子上的电荷则显著增加,说明 MAC 在与磷铑配体络合过程中有电荷向铑原子上进行了转移,电荷可能来自与 Rh 形成配键的氧原子和碳碳双键.从该表中还可看出,络合后三种络合物中 MAC 的主要原子上的电荷分布基本一致.说明这三种不同配体的磷铑络合物在络合后对 MAC 的主要原子上的电荷分布影响不大.

此外,在  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R})-\text{DIPAMP}]^+$  与  $[\text{Rh}(\text{R}, \text{R}-\text{DIPAMP})(\text{MAC})]^+$  中, C(11), C(12), C(17), C(18) (即与磷原子相连的四个碳原子)上的电荷分布明显不同于另两种配体及它们与(MAC)形成的络合物中相应的碳原子上的电荷分布,可以看出与 P(2)相连的 C(12)上的电荷要多于 C(11),同样与 P(3)相连的 C(18)上的电荷要多于 C(17),这是因为 C(12), C(18)也为连有甲氧基的苯环上的碳原子.这应与甲氧基为推电子基团有关.

$[\text{Rh}(\text{S}, \text{S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$  与  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S}-\text{CHIRAPHOS})(\text{MAC})]^+$  中的 C(9), C(10) (即  $[\text{Rh}(\text{S}, \text{S})-\text{CHIRAPHOS}]^+$  上连有手性甲基的两个碳原子)上的电荷分布明显低于另两种配体及它们与(MAC)形成的络合物中相应的碳原子上的电荷,这应与手性甲基与这两个原子相连有关.

### 3 结论

从以上讨论可看出:(1)采用从头计算方法对含有磷铑络合物的较大催化体系的全优化的计算是可行

的; (2) 分子构型不同的双膦配体及其所形成的膦铑络合物中大部分主要原子间的键长、键角数据相差不大, 手性的不同对膦铑络合物的少部分键长、键角数据有所影响; (3) 在与 (MAC) 形成络合物前后, 双膦配体上主要原子的电荷分布变化并不显著, 但金属铑原子上的电荷则显著增加, 可能是 MAC 在与膦铑配体络合过程中有电荷向铑原子上进行了转移。

#### 参考文献:

- [1] 林国强, 陈耀全, 陈新滋, 李月明. 手性合成 - 不对称反应及其应用[M]. 北京: 科学出版社, 2000. 250 ~ 253.
- [2] Steven Feldgus, Clark R. Landis. Large - Scale Computational Modeling of  $[\text{Rh}(\text{DuPHOS})]^+$  - Catalyzed Hydrogenation of Prochiral Enamides: Reaction Pathways and the Origin of Enantioselection[J]. J. Am. Chem. Soc., 2000, 122(51): 12714 ~ 12727.
- [3] Achim Kless, Armin Börner, Detlef Heller, Rudiger Selke. Ab Initio Studies of Rhodium(I) - N - Alkenylamide Relevance for the Mechanism of Catalytic Asymmetric Hydrogenation of Prochiral Dehydroamino Acids[J]. Organometallics., 1997, 16(10): 2096 ~ 2100.
- [4] Portmann S, Luthi H P. Molekel: An Interactive Molecular Graphics Tool[J]. CHIMIA, 2000, (54): 766 ~ 770.

(上接第 134 页)

以上图形是在衍射孔尺寸为 1.5 mm, 衍射距离为 50 mm 时的菲涅尔衍射结果, 可以看出, 计算的结果与数码相机记录结果很吻合, 说明基于 MATLAB 模拟计算衍射场是可行的, 这些结果我们已经用于教育厅基金项目研究中。

MATLAB 允许用不同格式输出图形, 图 7 是用网格图的形式输出的矩形孔衍射图案, 可以方便地观察衍射图案的细节。

另外, 夫朗和费衍射的计算结果吻合得也很好, 这里不再给出。

衍射是一个古老的问题, 但直到 19 世纪科学家才把他弄清楚, 而衍射的计算又很复杂, 这使得很多问题很难解决, 如今有了计算机和高级科学计算软件, 使我们可以很方便地计算许多问题, 这也使得光的传播问题可以用模拟的方式来解决。

#### 参考文献:

- [1] 赵达尊, 张怀玉. 波动光学[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1999. 102 ~ 113.
- [2] 苏显渝, 李继陶. 信息光学[M]. 北京: 科学出版社, 2000. 34 ~ 45.
- [3] Grant R. Fowles. Introduction to Modern Optics[M]. New York: Dover Publications, Inc., 1989. 106 ~ 111.
- [4] 王炳武, 等. MATLAB5.3 实用教程[M]. 北京: 中国水利水电出版, 2000. 227 ~ 230.