

研究论文

几种磺酰胺类除草剂的¹H NMR谱的理论研究

刘兴艳, 廖显威, 陈国力, 张红梅, 范志金

四川师范大学 化学与材料科学学院, 成都 610066

收稿日期 2007-3-9 修回日期 2007-4-7 网络版发布日期 接受日期

摘要 在HF/6-31G(d)水平上对8种N-(4'-甲基嘧啶)-N-取代基-2-硝基苯磺酰胺化合物11-8进行全参数优化和振动分析, 并在HF/6-31G(d)水平上所得的优化构型的基础上, 用GIAO方法在B3LYP/6-31G(d)水平上计算了它们的核磁共振氢谱, 计算结果与实验值较为吻合.

关键词 [核磁共振氢谱](#); [磺酰胺类](#); [量子化学计算](#); [B3LYP/6-31G\(d\)](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

廖显威 xuyuanxin@yahoo.com

作者个人主页: 刘兴艳; 廖显威; 陈国力; 张红梅; 范志金

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (354KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“核磁共振氢谱; 磺酰胺类; 量子化学计算; B3LYP/6-31G\(d\)” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [刘兴艳](#)

· [廖显威](#)

· [陈国力](#)

· [张红梅](#)

· [范志金](#)