

呋喃和苯多烯醛分子中的共轭效应和共轭基干

虞忠衡,蒋明谦,戴萃辰,褚文华

中国科学院化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 呋喃和苯多烯醛系列的CNDO/2和微扰分子轨道法的计算表明,共轭效应与共轭基干是两个不同的概念,共轭效应包括了共轭基团之间的作用对分子性能全面的影响,而共轭基干仅仅反映了共轭基团间的作用对前沿分子轨道的影响。这意味着,相互之间有共轭作用的基团不一定属于同一个基干,属于同一个共轭基干的基团之间,必定有共轭作用。共轭基干更确切的反映了共轭基团间的作用对分子结构的依赖。

关键词 [苯](#) [共轭](#) [甲氧基](#) [烯烃 P](#) [微分重叠全忽略近似](#) [醛](#) [分子轨道理论](#) [微扰论](#) [呋喃](#)

分类号 [0641](#)

The conjugation and conjugated stem in furyl and phenyl-polyenal

YU ZHONGHENG,JIANG MINGQIAN,DAI CUICHEN,CHU WENHUA

Abstract The results of CNDO/2 and PMO calculation of polyenals $\text{MeO}(\text{CH}:\text{CH})_3\text{CHO}$ and $\text{RCH}:\text{CHCHO}$ ($\text{R} = \text{furyl}, \text{Ph}$) indicate a distinction between conjugation and conjugated stem, i.e., the conjugation includes an overall change of mol. properties resulting from interaction among conjugated groups; the conjugated stem reflects only the effect of the interaction on the frontier MO's.

Key words [BENZENE](#) [CONJUGATION](#) [METHOXY GROUP](#) [ALKENE P](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [ALDEHYDES](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [PERTURBATION THEORY](#) [FURAN](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [HTML全文\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“苯”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [虞忠衡](#)
- [蒋明谦](#)
- [戴萃辰](#)
- [褚文华](#)