

C₆₀NH_{5/6}, 6/6异构体的理论研究

尚振锋, 潘荫明, 王海翔, 赵学庄, 唐敖庆

南开大学化学系; 吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用半经验的AM1, PM3及ab initio方法对C₆₀NH两种异构体的结构及光谱进行了理论计算。结果表明, 具有开环结构的C₆₀NH的5/6异构体稳定性要高于具有闭环结构的6/6异构体。计算了两种异构体开环与闭环过程的反应坐标, 发现6/6开环异构体是势能面上的一局部最小点, 而5/6闭环异构体不存在6/6异构体的H可以在两种镜面异构体之间快速翻转, 使其核磁共振谱呈现C_{2v}对称性。通过振动分析确认了所优化的构型确实为势能面的能量最低点, 并得到了C₆₀NH各异构体的红外光谱。

关键词 [红外分光光度法](#) [核磁共振谱法](#) [异构体](#) [从头计算法](#) [过渡态理论](#) [富勒烯](#)

分类号 [0641](#)

Theoretical study of C₆₀NH 5/6, 6/6 isomers

SHANG ZHENFENG, PAN YINMING, WANG HAIXIANG, ZHAO XUEZHUANG, TANG AOQING

Abstract Semi-empirical and ab initio studies on the structure and spectra of C₆₀NH are reported. The C_s(5/6) isomer with annulene structure is more stable than that of C_s(6/6) isomer. The reaction coordinates for the opening and closing of the transannular bond in the 6/6-closed and 5/6-open isomers have been calculated. There is a shallow minimum corresponding to a 6/6-open structure. The H atom of 6/6 isomer can be fast inverted between two mirror isomers so its NMR spectra show C_{2v} symmetry. The vibrational analysis indicates that the optimized geometry is surely the minimum energy point in the potential surface. The IR spectra of C₆₀NH are obtained by calculation.

Key words [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [NMR SPECTROMETRY](#) [ISOMER](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [TRANSITION STATE THEORY](#) [FULLERENES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(371KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“红外分光光度法”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [尚振锋](#)
- [潘荫明](#)
- [王海翔](#)
- [赵学庄](#)
- [唐敖庆](#)