

研究论文

双过氧钒配合物与3-取代吡啶相互作用的NMR研究

易平贵*,a,b 于贤勇a,b 张峻b 郑柏树a

黄昊文a,b 曾云龙a 陈忠b

(a湖南科技大学化学化工学院 分子构效关系湖南省普通高等学校重点实验室 湘潭 411201)

(b厦门大学物理系 固体表面物理化学国家重点实验室 厦门 361005)

收稿日期 2008-2-25 修回日期 2008-5-26 网络版发布日期 2008-11-5 接受日期 2008-6-18

摘要

为探讨有机配体上取代基团对反应平衡的影响,在模拟生理条件下(0.15 mol/L NaCl溶液),应用多核(^1H 、 ^{13}C 和 ^{51}V)多维(DOSY)以及变温NMR技术研究双过氧钒配合物 $[\text{OV}(\text{O}_2)_2(\text{D}_2\text{O})]^-/[\text{OV}(\text{O}_2)_2(\text{HOD})]^-$ (简称为dpV)与3-取代吡啶的相互作用,并首次报道了一些物种的NMR化学位移. dpV与有机配体的反应性从强到弱的顺序为:吡啶>烟酸根>烟酸甲酰胺 \approx 烟酸甲酯,这说明吡啶环上取代基影响反应平衡. 竞争配位导致一系列新的6配位的过氧钒物种生成. 密度泛函计算结果合理地解释了实验结果,并表明溶剂化效应在反应中起重要作用.

关键词

[双过氧钒配合物](#) [3-取代吡啶](#) [相互作用](#) [核磁共振](#) [理论计算](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

易平贵 yipinggui@sohu.com

作者个人主页:

易平贵*;a;b 于贤勇a;b 张峻b 郑柏树a

黄昊文a;b 曾云龙a 陈忠b

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (280KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (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 “](#)

[双过氧钒配合物” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [易平贵,于贤勇,张峻,郑柏树,黄昊文,曾云龙,陈忠](#)