

AMT异构体互变机理的理论研究

武海顺; 许小红; 马文瑾; 贾建峰

山西师范大学化学与材料科学学院, 临汾 041004

摘要:

用密度泛函理论(DFT)的B3LYP/6-311G(d, p)和Müller-Plesset微扰理论的MP2/6-31G(d)方法, 优化了AMT(2-氨基-5-巯基-1,3,4-噻二唑)各种异构体和过渡态结构的几何构型, 并对它们的电子结构、振动光谱和化学键性质进行了研究. 还研究了AMT异构体的互变机理, 提出了AMT异构体a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow d \rightarrow a的循环式互变途径. 进一步完成了对AMT异构体成键方式的自然键轨道(NBO)分析.

关键词: 2-氨基-5-巯基-1,3,4-噻二唑(AMT) 密度泛函理论(DFT) Müller-Plesset微扰理论 过渡态

收稿日期 2002-08-15 修回日期 2002-11-07 网络版发布日期 2003-05-15

通讯作者: 武海顺 Email: wuhs@dns.sxtu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1519KB\)](#)

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](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

[2-氨基-5-巯基-1,3,4-噻二唑\(AMT\)](#)

[密度泛函理论\(DFT\)](#)

[Müller-Plesset微扰理论](#)

[过渡态](#)

本文作者相关文章

[武海顺](#)

[许小红](#)

[马文瑾](#)

[贾建峰](#)