

环己烷类液晶化合物的量子化学研究: 联苯基乙烷类系列

易行焕, 易雪枫, 贡雪东, 肖鹤鸣

南京理工大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 运用AM1和PM3两种SCF-MO方法, 通过能量梯度全优化计算, 给出了25种环己烷类液晶化合物的稳定几何构型、电子结构和生成热、偶极矩等基本性质。联系有机电子结构理论进行了讨论。

关键词 [液晶](#) [环己烷 P](#) [生成热](#) [电子结构](#) [硅烷 P](#) [构型](#) [乙烷 P](#) [偶极矩](#) [联苯 P](#) [梯度算法](#) [AM1](#)

分类号 [0621.16](#) [0641](#)

Quantum-chemical studies on silacyclohexane-based liquid crystal compounds: 4-(2-(Trans-silacyclohexyl) ethyl) biphenyl series

YI XINGHUAN, YI XUEFENG, Gong Xuedong, XIAO HEMING

Abstract AM1 and PM3 SCF-MO calculations have been performed to obtain molecular geometries of 25 silacyclohexane-based liquid crystal compounds by energy gradient completed optimization. The electronic structure and some molecular properties (heat of formation and dipole moment) are also obtained. The calculated results are discussed in detail relating to classical organic electronic theory.

Key words [LIQUID CRYSTAL](#) [CYCLOHEXANE P](#) [FORMATION HEAT](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [SILANE P](#) [CONFIGURATION](#) [ETHANE P](#) [DIPOLE MOMENTS](#) [DIPHENYL P](#) [GRADIENT ALGORITHM](#) [AM1](#)

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“液晶”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [易行焕](#)
- [易雪枫](#)
- [贡雪东](#)
- [肖鹤鸣](#)