

谢滢婷,李梦阳,陈鹏威,等.取代基对2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶紫外吸收能量的影响[J].湖南科技大学学报(自然科学版),2021,36(4):71-76. doi:10.13582/j.cnki.1672-9102.2021.04.010

XIE Y T, LI M Y, CHEN P W, et al. The Influence of Substituents on the UV Absorption Energies of 2-(4-X Phenyl)-5-Y Pyrimidines [J]. Journal of Hunan University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2021,36(4):71-76. doi:10.13582/j.cnki.1672-9102.2021.04.010

# 取代基对2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶 紫外吸收能量的影响

谢滢婷,李梦阳,陈鹏威,袁华\*

(湖南科技大学 化学化工学院,理论有机化学与功能分子教育部重点实验室,湖南 湘潭 411201)

**摘要:**测定了46个2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶的紫外可见吸收光谱,研究了共轭链两端取代基X,Y对紫外最大吸收波长 $\lambda_{\max}$ 对应的能量 $v_{\max}$ 的影响规律,提取表征基态取代基电子效应的Hammett参数 $\sigma$ 和表征激发态取代基电子效应的激发态取代基参数 $\sigma_{\text{CC}}^{\text{ex}}$ 对 $v_{\max}$ 建立定量结构-性质相关模型,得到了相关系数高( $R^2=0.9487$ )、平均相对误差小( $D=1.26\%$ )的5参数模型.结果表明,取代基X,Y的共轭效应、激发态取代基效应及取代基的交叉相互作用对化合物的紫外吸收有较大影响.结合各参数前面的系数对模型的物理意义进行了合理解释,并与本课题组之前研究的取代基对2-X-5-Y嘧啶类化合物的紫外吸收能量的影响规律进行了比较.

**关键词:**2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶;紫外可见吸收光谱;取代基效应;定量结构-性质相关;激发态取代基参数  
**中图分类号:** O621.1      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1672-9102(2021)04-0071-06

## The Influence of Substituents on the UV Absorption Energies of 2-(4-X Phenyl)-5-Y Pyrimidines

XIE Yingting, LI Mengyang, CHEN Pengwei, YUAN Hua

(Key Laboratory of Theoretical Organic Chemistry and Function Molecule, Ministry of Education,  
School of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China)

**Abstract:** The UV-visible absorption spectrums of 46 2-(4-X phenyl)-5-Y pyrimidines were recorded in anhydrous ethanol. The effects were discussed, that of substituents X and Y at the ends of the conjugate chain on the UV absorption energy  $v_{\max}$ , which corresponding to the maximum absorption wavelength  $\lambda_{\max}$ . Hammett parameters ( $\sigma$ ,  $\sigma_{\text{F}}$ ,  $\sigma_{\text{R}}$ ) and the excited-state substituent effect parameter  $\sigma_{\text{CC}}^{\text{ex}}$ , characterizing the substituent electronic effects of the ground state and the excited state respectively, were employed to regress against  $v_{\max}$ . A five-descriptor model was built with high correlation coefficient ( $R^2=0.9487$ ) and small average relative deviation ( $D=1.26\%$ ). The results indicate that the conjugate effect descriptor, excited-state substituent effect parameter and the cross interaction parameter of substituents X and Y have great effect on the UV absorption. The physical meaning of the model is elucidated based on the regression coefficients before each descriptor. The substituent effects on the UV absorption of 2-(4-X phenyl)-5-Y pyrimidines are compared to those observed in

收稿日期:2021-08-27

基金项目:湖南省自然科学基金资助项目(2019JJ40078)

\*通信作者,E-mail: yh\_cathy@163.com

2-X-5-Y pyrimidines before.

**Keywords:** 2-(4-X phenyl)-5-Y pyrimidine; UV-visible absorption spectrum; substituent effect; quantitative structure-property relationship; excited-state substituent effect parameter

近年来,含有离域  $\pi$  键的有机分子在光电材料领域的应用引起了人们的广泛关注<sup>[1-2]</sup>,在共轭体系中引入芳杂环不仅有利于分子内电荷的转移,还可以改变和增强母体的光电性能.嘧啶环是 1,3-位含 2 个氮原子的极性芳杂环,其固有偶极对于共轭体系的  $\pi$  电子离域有着重要的影响.因此,含嘧啶环的线性共轭长链化合物具有优良的光电性能,被广泛应用于太阳能电池<sup>[3-4]</sup>、液晶材料<sup>[5]</sup>和发光器件<sup>[6-7]</sup>等领域.

紫外(UV)吸收光谱是由于分子中价电子的跃迁而产生的吸收光谱,它反映了分子中电子的排布特征.紫外吸收能量既与分子的结构密切相关,也与分子的其他光电性能有着紧密联系.研究含嘧啶环的共轭体系的紫外吸收能量与分子结构之间的关系,有助于了解分子中的电子排布,理解分子结构对该类化合物光电性质的影响规律,进而通过结构修饰对光电性质进行有效调控.

所研究的嘧啶类化合物的结构如图 1.本课题组合成了 46 个 2-(4-X 苯基)-5-Y 嘧啶(图 1a)<sup>[8]</sup>,并测定其紫外可见吸收光谱.由图 1a 可知:这组化合物的母体骨架 2-苯基嘧啶固定不变,改变的是苯环 4-位和嘧啶环 5-位上的取代基 X, Y.本文拟用表征取代基 X, Y 的结构参数对该系列 2-(4-X 苯基)-5-Y 嘧啶的紫外最大吸收波长  $\lambda_{\max}$  所对应的能量建立定量结构-性质相关(QSPR)模型,探索取代基对模型化合物紫外吸收能量的影响规律,并与本课题组之前研究的取代基对 2-X-5-Y 嘧啶(图 1b)紫外吸收的影响规律进行比较分析,探讨共轭链延长对紫外吸收能量的影响.

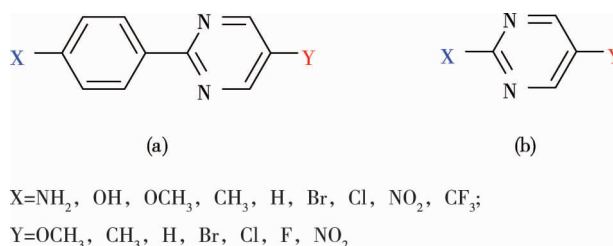


图 1 所研究的嘧啶类化合物的结构

## 1 实验部分及分子结构参数

### 1.1 紫外光谱测定

以无水乙醇为溶剂,在日本岛津紫外可见分光光度计 UV-2550 中测定化合物的紫外光谱.扫描范围控制在 200~450 nm,扫描速度为 10 nm/s.将测得的紫外最大吸收波长  $\lambda_{\max}$  (nm) 转换为波数  $\nu_{\max}$  ( $\nu_{\max} = 1/\lambda_{\max}, \text{cm}^{-1}$ ).根据  $E = h\nu$ ,文章即用波数  $\nu_{\max}$  表示紫外最大吸收波长的能量.

### 1.2 分子结构参数

基于紫外吸收光谱原理,分子吸收能量后价电子从低能级跃迁到高能级,分子从基态变化到激发态.跃迁能即紫外光谱吸收能,等于激发态与基态分子能量之差.那么,基态和激发态的分子结构特征都会影响紫外吸收能量.因此,拟用表征基态和激发态电子结构特征的参数来对紫外最大吸收波数  $\nu_{\max}$  进行相关分析和建模.

Hammett 参数  $\sigma$ <sup>[9-10]</sup> 是经典的描述基态电子效应的结构参数,在定量结构-性质相关研究中有着非常广泛的应用.Hammett 参数  $\sigma$  包括诱导效应参数  $\sigma_{\text{F}}$  和共轭效应参数  $\sigma_{\text{R}}$ ,且  $\sigma = \sigma_{\text{F}} + \sigma_{\text{R}}$ .因此,用  $\sigma_{\text{F}}$  和  $\sigma_{\text{R}}$  代替  $\sigma$  进行定量相关分析,以便更清楚地了解诱导效应和共轭效应对紫外吸收能量的影响<sup>[11-12]</sup>.此外,共轭链两端取代基之间的相互作用也会影响体系的性质,文章采用曹晨忠<sup>[13-14]</sup>提出的参数  $\Delta\sigma^2$  ( $\Delta\sigma^2 = [\sigma(\text{X}) - \sigma(\text{Y})]^2$ ) 来描述取代基 X, Y 的交叉相互作用.

激发态取代基参数  $\sigma_{\text{CC}}^{\text{ex}}$ <sup>[15]</sup> 是表征激发态电子结构特征的参数,该参数被广泛地应用于紫外吸收光

谱<sup>[16]</sup>、荧光光谱<sup>[17-18]</sup>、核磁共振化学位移<sup>[19-20]</sup>和氧化还原电位<sup>[21]</sup>等的定量结构-性质相关中.因此,在文章研究的紫外光谱吸收能量中也有必要将该参数考虑进来.各化合物建模所用的 Hammett 参数  $\sigma$ ,  $\sigma_F$  和  $\sigma_R$  均来自文献[10],激发态取代基参数  $\sigma_{CC}^{ex}$  来自文献[15].

## 2 结果与讨论

### 2.1 定量结构-性质相关模型的建立

基于1.2节所述结构参数对46个2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶的紫外最大吸收波数  $\nu_{max}$  进行逐步回归分析,寻找最佳子集模型.结果表明,由  $\sigma_R(X)$ 、 $\sigma_R(Y)$ 、 $\sigma_{CC}^{ex}(X)$ 、 $\sigma_{CC}^{ex}(Y)$  和  $\Delta\sigma^2$  所建立的五参数线性回归模型的性能最好,如式(1)所示.为了检验模型的稳定性和预测能力,对式(1)进行留一法交叉验证(Cross Validation, CV),统计结果也列于式(1).

$$\nu_{max} = 39\,030.71 + 3\,917.93\sigma_R(X) - 2\,130.06\sigma_R(Y) + 2\,365.05\sigma_{CC}^{ex}(X) + 3\,042.41\sigma_{CC}^{ex}(Y) - 3\,066.79\Delta\sigma^2; \quad (1)$$

$$R^2 = 0.948\,7, S = 628.52, D = 1.26\%, F = 148.03, n = 46, R_{CV}^2 = 0.927\,9, S_{CV} = 754.85, D_{CV} = 1.52\%.$$

式中: $R^2$ 为相关系数; $S$ 为标准偏差; $D$ 为平均相对误差; $F$ 为统计量; $n$ 为样本数; $R_{CV}^2$ 为交叉验证的相关系数; $S_{CV}$ 为交叉验证的标准偏差; $D_{CV}$ 为交叉验证的平均相对误差.

由式(1)可知:模型的相关系数  $R^2 = 0.948\,7$ ,平均相对误差  $D$  仅为  $1.26\%$ ,说明模型能比较准确地描述取代基 X, Y 的结构特征对紫外最大吸收波数  $\nu_{max}$  的影响.交叉验证的结果与回归模型的结果相当,平均相对误差 ( $1.52\%$ ) 很小,完全在实验误差范围之内,说明该模型性能稳定,且可以准确地预测 2-(4-X 苯基)-5-Y 嘧啶的紫外最大吸收波数  $\nu_{max}$ ,进而计算波长  $\lambda_{max}$  和能量.

从式(1)所用的结构参数来看,2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶的  $\nu_{max}$  主要受取代基 X, Y 的共轭效应、激发态取代基参数及共轭链两端取代基 X, Y 的交叉相互作用项的影响.由各参数前面的回归系数可知,取代基 X, Y 的共轭效应对  $\nu_{max}$  的影响规律相反.取代基 X 的吸电子共轭效应使  $\nu_{max}$  增大,紫外光谱最大吸收峰发生蓝移;而取代基 Y 的吸电子共轭效应使  $\nu_{max}$  减小,紫外光谱最大吸收峰发生红移.模型没有用到  $\sigma_F(X)$  和  $\sigma_F(Y)$ ,说明在所研究的共轭体系中,取代基的诱导效应对化合物紫外吸收的影响较小,主要通过共轭效应来体现取代基对分子整体电子分布的影响.此外,交叉相互作用项  $\Delta\sigma^2$  前面的系数为负,说明取代基 X, Y 的 Hammett 参数之间的差值越大,即取代基 X 为强供电子基而取代基 Y 为强吸电子基时,  $\nu_{max}$  值就越小,紫外光谱最大吸收峰发生明显红移.例如,2-(4-氨基苯基)-5-硝基嘧啶 ( $X = NH_2$ ,  $Y = NO_2$ ) (No.46) 的紫外光谱最大吸收波长  $\lambda_{max}$  为  $416.90\text{ nm}$ ,是46个化合物中  $\lambda_{max}$  最大的.

根据式(1)计算了46个化合物的  $\nu_{max(cal)}$ ,并将  $\nu_{max(cal)}$  转化为波长  $\lambda_{max(cal)}$ ,见表1.以  $\lambda_{max(cal)}$  对  $\lambda_{max(exp)}$  作图,如图2.由图2可知:计算值  $\lambda_{max(cal)}$  与实验值  $\lambda_{max(exp)}$  非常接近,直观地反映了所建立的模型能比较准确地估算 2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶衍生物的紫外最大吸收波数  $\nu_{max}$ .

表1 2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶的  $\lambda_{max}$  (nm) 实验值和计算值

No.	X	Y	$\lambda_{max(exp)}/\text{nm}^a$	$\lambda_{max(cal)}/\text{nm}^b$	No.	X	Y	$\lambda_{max(exp)}/\text{nm}^a$	$\lambda_{max(cal)}/\text{nm}^b$
1	CF <sub>3</sub>	OCH <sub>3</sub>	266.60	270.03	24	F	F	255.27	258.68
2	F	OCH <sub>3</sub>	263.20	270.40	25	Cl	F	261.40	258.46
3	Cl	OCH <sub>3</sub>	268.50	272.70	26	H	F	254.93	249.79
4	H	OCH <sub>3</sub>	263.47	259.88	27	CH <sub>3</sub>	F	261.93	257.90
5	CH <sub>3</sub>	OCH <sub>3</sub>	267.87	266.21	28	OH	F	281.90	275.60
6	OH	OCH <sub>3</sub>	283.20	281.85	29	OCH <sub>3</sub>	F	278.33	275.23
7	OCH <sub>3</sub>	OCH <sub>3</sub>	280.40	283.08	30	CF <sub>3</sub>	Cl	258.80	257.64
8	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	265.71	265.29	31	F	Cl	265.13	268.16
9	F	CH <sub>3</sub>	257.40	267.75	32	Cl	Cl	273.10	266.66
10	Cl	CH <sub>3</sub>	266.20	269.24	33	H	Cl	262.53	259.04

续表

No.	X	Y	$\lambda_{\max(\text{exp})}/\text{nm}^a$	$\lambda_{\max(\text{cal})}/\text{nm}^b$	No.	X	Y	$\lambda_{\max(\text{exp})}/\text{nm}^a$	$\lambda_{\max(\text{cal})}/\text{nm}^b$
11	H	CH <sub>3</sub>	255.67	257.68	34	CH <sub>3</sub>	Cl	272.00	269.05
12	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	264.87	264.62	35	OH	Cl	293.80	290.11
13	OH	CH <sub>3</sub>	282.50	281.04	36	OCH <sub>3</sub>	Cl	289.33	288.83
14	OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	277.20	281.77	37	F	Br	268.40	270.12
15	NO <sub>2</sub>	H	286.40	286.47	38	Cl	Br	275.33	268.60
16	F	H	258.80	265.72	39	H	Br	251.27	260.87
17	Cl	H	263.80	265.93	40	CH <sub>3</sub>	Br	275.33	271.02
18	Br	H	266.60	268.63	41	OH	Br	295.10	292.40
19	H	H	256.33	256.21	42	OCH <sub>3</sub>	Br	291.50	291.10
20	CH <sub>3</sub>	H	264.60	264.31	43	NO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	296.00	303.62
21	OH	H	285.20	282.33	44	CF <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>	289.60	282.80
22	OCH <sub>3</sub>	H	281.20	282.24	45	Cl	NO <sub>2</sub>	311.00	303.01
23	CF <sub>3</sub>	F	251.40	252.01	46	NH <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	416.90	419.21

注:a来自本文实验;b由式(1)计算

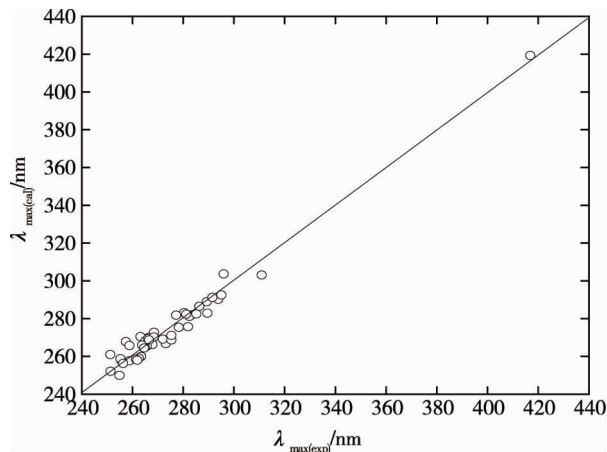


图2 2-(4-取代苯基)-5-取代嘧啶的 $\lambda_{\max}$ 计算值对实验值作图

为进一步探究式(1)中各结构参数对模型的贡献,根据文献[22]的方法计算了各参数对模型的相对贡献值( $\Psi_r$ )和百分比贡献值( $\Psi_f$ ),列于表2.

表2 式(1)中各结构参数的相对贡献值( $\Psi_r$ )和百分比贡献值( $\Psi_f$ )

descriptor	$\sigma_R(X)$	$\sigma_R(Y)$	$\sigma_{CC}^{ex}(X)$	$\sigma_{CC}^{ex}(Y)$	$\Delta\sigma^2$
$\Psi_r(i)$	-10 39.82	464.91	-539.33	-824.76	-513.56
$\Psi_f(i)/\%$	29.17	13.04	15.13	23.13	14.40

由表2可知:嘧啶环5-位取代基Y的激发态取代基参数对 $v_{\max}$ 的影响大于取代基X,而其共轭效应对 $v_{\max}$ 的影响却小于X,说明取代基Y对激发态的贡献大,而取代基X对基态的贡献大;此外,交叉相互作用项 $\Delta\sigma^2$ 对 $v_{\max}$ 的百分比贡献为14.40%,说明共轭链两端的取代基X,Y的相互作用对紫外吸收也有较大影响.尽管取代基X,Y中间隔了一个苯环和一个嘧啶环,但电子的离域使得相隔较远的2个取代基仍然有着不可忽略的相互作用.

## 2.2 取代基对2个系列嘧啶衍生物紫外吸收影响规律的比较

本课题组前期研究了偶极两端取代基X,Y对2-X-5-Y嘧啶紫外吸收的影响规律<sup>[11]</sup>,建立的定量相关模型如式(2)所示.

$$v_{\max} = 35\ 864.812\ 2 + 6\ 743.790\ 1\sigma_R(X) + 8\ 587.993\ 7\sigma_R(Y) - 2\ 042.728\ 0\Delta\sigma^2 + 1\ 106.003\ 4H(X) +$$

$$1.451.8873\chi(X); \quad (2)$$

$$R^2=0.9724, S=693.70, D=1.49\%, F=218.68, n=37.$$

式中:  $H(X)$  为重原子效应指示变量;  $\chi(X)$  为取代基的电负性效应参数.

对比式(1)和式(2),发现取代基对2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶和2-X-5-Y嘧啶2个系列化合物紫外吸收的影响规律存在明显差异:

1) 从参数前面的回归系数来看,取代基X,Y的共轭效应对2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶类化合物紫外最大吸收波数  $\nu_{\max}$  的作用规律相反,而对2-X-5-Y嘧啶紫外最大吸收波数  $\nu_{\max}$  的影响规律相同.

2) 取代基X,Y的激发态取代基参数  $\sigma_{\text{CC}}^{\text{ex}}$  对2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶的  $\nu_{\max}$  有重要影响,而对2-X-5-Y嘧啶的  $\nu_{\max}$  影响很小,因此模型中未考虑该参数.另外,取代基的电负性效应参数  $\chi(X)$  和重原子效应指示变量  $H(X)$  对2-X-5-Y嘧啶的  $\nu_{\max}$  也有影响,而对2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶类化合物的影响可以忽略,故没有考虑进来.

由此说明,共轭链延长,也即母体结构发生变化,会使偶极两端取代基对分子中电子分布的影响规律发生变化<sup>[16,20]</sup>.

### 3 结论

1) 2-(4-X苯基)-5-Y嘧啶类化合物的紫外吸收能量主要受共轭链两端取代基X,Y的共轭效应、激发态取代基效应以及取代基的交叉相互作用的影响.

2) 取代基X和Y的共轭效应对  $\nu_{\max}$  的影响相反,取代基X为强供电子基而Y为强吸电子基时,有利于紫外吸收的红移.因此,可以通过改变取代基来设计具有不同紫外最大吸收波长的化合物.

3) 通过对2-(4-X-苯基)-5-Y嘧啶和2-X-5-Y嘧啶2个系列化合物紫外吸收能量的取代基效应进行比较,发现母体结构不同的化合物,其取代基效应有着明显的区别,进一步确证取代基效应不能脱离母体结构而孤立地考虑取代基的性质.

#### 参考文献:

- [1] Su S J, Cai C, Kido J. Three-carbazole-armed host materials with various cores for RGB phosphorescent organic light-emitting diodes[J]. *Journal of Materials Chemistry*, 2012, 22(8): 3447-3456.
- [2] Charline D, Oana M, Christine B, et al. Synthesis and photophysical properties of push-pull structures incorporating diazines as attracting part with a fluorene core[J]. *European Journal of Organic Chemistry*, 2013(25): 5591-5602.
- [3] Sun H, Liu D, Wang T, et al. Enhanced internal quantum efficiency in dye-sensitized solar cells: effect of long-lived charge-separated state of sensitizers[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2017, 9(11): 9880-9891.
- [4] Wu Z, Li X, Agren H, et al. Pyrimidine-2-carboxylic acid as an electron-accepting and anchoring group for dye-sensitized solar cells[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2015, 7(48): 26355-26359.
- [5] Vlachos P, Kelly S M, Mansoor B, et al. Electron-transporting and photopolymerisable liquid crystals[J]. *Chemical Communications*, 2002, 8(8): 874-875.
- [6] Hudson Z M, Wang Z, Helander M G, et al. N-Heterocyclic carbazole-based hosts for simplified single-layer phosphorescent OLEDs with high efficiencies[J]. *Advanced Materials*, 2012, 24(21): 2922-2928.
- [7] Wu C C, Lin Y T, Chiang H H, et al. Highly bright blue organic light-emitting devices using spirofluorene-cored conjugated compounds[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, 81(4): 577-579.
- [8] Yuan H, Chen P W, Li M Y, et al. Effects of substituents X and Y on the NMR chemical shifts of 2-(4-X phenyl)-5-Y pyrimidines[J]. *Journal of Molecular Structure*, 2020, 1204: 127489.
- [9] Hammett L P. The effect of structure upon the reactions of organic compounds. Benzene Derivatives[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1937, 59(1): 96-103.

- [10] 曹晨忠. 有机化学中的取代基效应[M]. 2版. 北京: 科学出版社, 2019.
- [11] Yuan H, Li M Y, Chen C N, et al. Substituent effects on the UV absorption energy of 2,5-disubstituted pyrimidines[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2018, 31: e3860.
- [12] 冯娇娇, 曹晨忠. 二芳基硝酮-银纳米超分子体系的紫外光谱[J]. *湖南科技大学学报(自然科学版)*, 2020, 35(2): 95-99.
- [13] Cao C, Lu B, Chen G. Investigation of the substituent specific cross-interaction effects on  $^{13}\text{C}$  NMR of the C=N bridging group in substituted benzylidene anilines[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2011, 24: 335-341.
- [14] Yuan H, Zhang Y, Chen C N, et al. Is there substituent cross-interaction effect in all the conjugated systems containing C=N polar bond? The substituent effects on the NMR chemical shifts of 2, 5-disubstituted pyrimidines[J]. *Journal of Molecular Structure*, 2018, 1155: 143-151.
- [15] Cao C, Chen G, Yin Z. Excited-state substituent constants from substituted benzenes[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2008, 21(9): 808-815.
- [16] Cao C, Zhu Y, Chen G. Effect of substituents and conjugated chain length on the UV spectra of  $\alpha, \omega$ -di-substituted phenyl polyenes[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2013, 26(10): 834-839.
- [17] 李路瑶, 曹朝曦, 刘军兰. 取代-N-(2-羟基苯亚乙基)苯胺-银纳米超分子体系荧光光谱[J]. *湖南科技大学学报(自然科学版)*, 2020, 35(4): 83-88.
- [18] 曹丽波, 曹朝曦, 张景远. 羟基二芳基希夫碱及其在银纳米颗粒作用下的荧光性能[J]. *湖南科技大学学报(自然科学版)*, 2019, 34(3): 90-95.
- [19] 程时茂, 曹晨忠. 取代基立体效应对氮苯叉苯胺氢核磁共振化学位移的影响[J]. *湖南科技大学学报(自然科学版)*, 2019, 34(2): 96-101.
- [20] Fang Z, Cao C, Wu W, et al. Long-range transmission of substituent effects on  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of imine carbon in benzylidene anilines[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2013, 26: 249-255.
- [21] Yuan H, Cao C T, Cao Z, et al. The influence of the excited-state substituent effect on the reduction potentials of Schiff bases[J]. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2016, 29: 145-151.
- [22] Liu F, Liang Y, Cao C, et al. QSPR study of GC retention indices for saturated esters on seven stationary phases based on novel topological indices[J]. *Talanta*, 2007, 72: 1307-1315.