

2|4-二氯-5-硝基嘧啶甲胺化的 *ab initio* 研究

李松,袁越,王雄莉,焦克芳

军事医学科学院毒物药物研究所|北京 100850

摘要:

关键词: 静电势 HOMO LUMO 胺化反应

收稿日期 1994-04-16 修回日期 1994-07-02 网络版发布日期 1995-05-15

通讯作者: 焦克芳 Email:

本刊中的类似文章

1. 赵文娜;邹建卫;商志才;郭明;俞庆森.结合三维静电势参数研究二取代苯的定量结构-疏水性关系 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 600-603
2. 杨鹏程;叶学其;计明娟;赵柱流;张卓娅;侯廷军;徐筱杰.分子筛模型中非骨架离子位置的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 817-820
3. 邹建卫;蒋勇军;胡桂香;曾敏;庄树林;俞庆森.多氯联苯的定量结构-性质(活性)关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 267-272
4. 侯廷军;安钰;廖宁;茹炳根;徐筱杰.金属硫蛋白聚合中阳离子作用机制的研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 356-361
5. 计明娟;杨鹏程.甲硫氨酸-脑啡肽的活性位点[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 596-600
6. 郭明;邹建卫;赵文娜;商志才;俞庆森.基于三维静电势参数研究C₆₀溶解性的构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 432-435
7. 王一波;史鸿运.从头计算研究乙酰胆碱构象和分子静电势[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 518-522

扩展功能

本文信息

PDF(800KB)

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

▶ 静电势

▶ HOMO

▶ LUMO

▶ 胺化反应

本文作者相关文章

▶ 李松

▶ 袁越

▶ 王雄莉

▶ 焦克芳