

研究论文

(CH₂)₂N和(CH₃)₂NH⁺的密度泛函理论计算

陈波珍; 黄明宝; 颜达予

中国科学技术大学研究生院化学部, 北京 100039

摘要:

关键词: 自由基 构象 超精细结构 密度泛函理论

收稿日期 1998-08-25 修回日期 1998-11-02 网络版发布日期 1999-06-15

通讯作者: 陈波珍 Email:

本刊中的类似文章

1. 侯若冰; 李伟伟; 义祥辉. 2'-脱氧胞苷-5'-磷酸羟基加合物的分子结构与电子结构[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 291-298
2. 王素华, 陈德文. 咪唑氮氧自由基的光催化氧化产生及其机理[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1014-1019
3. 蔡国强, 李文静, 俞庆森, 樊红军, 吴念慈. NHCH=CHR自由基结构和稳定性*ab initio*研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(12): 1084-1088
4. 应文明, 夏煜, 尚海蓉, 赵新生, 唐有祺. CH₃N₃的光解—生成三线态CH₃N自由基的光谱证据[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 961-964
5. 张文敏, 何光龙, 陆同兴. 光解苯半醌和2-羟基-2-丙基自由基的CIDEP谱[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 18-21
6. 汪志祥, 刘若庄, 黄明宝. NCFI自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 105-108
7. 储高升; 张淑娟; 姚思德; 窦大营; 张志成. SO₄^{•-}—自由基氧化酪氨酸反应中的溶剂效应[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 812-816
8. 李来才; 周红平; 田安民. NH₂自由基与O₃反应机理的从头计算[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 838-840
9. 杨保联; 冯继文; 胡建治; 周建成; 李丽云; 裘鉴卿; 叶朝辉. 稳定自由基掺杂有机物的动态核极化研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 93-96
10. 周晓国; 刘世林. 乙烯基A²A¹电子态的振转分析[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 481-485
11. 任丽; 孔繁敖. OH自由基与CO反应的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(06): 486-489
12. 王储记; 肖迎胜; 冉琴; 褚艺伟; 陈从香; 俞书勤; 马兴孝. CF₂自由基A态伸缩振动频率的测定[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 297-300
13. 高义德; 胡长进; 冉琴; 陈旸; 陈从香. 超声射流CCl₂自由基激光诱导荧光激发谱[J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 112-116
14. 陈旸; 裴林森; 冉琴; 高义德; 陈从香. CH自由基多光子电离新观测到3个*nd* Rydberg态[J]. 物理化学学报, 1999, 15(04): 299-302
15. 封学军; 李前树. 全氟代金刚烷及其自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1172-1174
16. 卢文庆; 金安定; 朱小蕾; 周志华; 黄锦凡. 2, 2, 3-三甲基丁烷(C₇H₁₆)晶体的成核动力学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(12): 1101-1107
17. 陈德文; 周建成; 马纫兰; 徐广智; 龙耀庭; 孙祥玉; 赵瑶兴. 毛细管柱GC/MS/ESR 联用研究自由基PBN加合物[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 802-808
18. 陈丽涛; 陈光巨; 傅孝愿. 氟、胺取代基对乙烯和甲醛环加成的影响[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 680-685
19. 俞庆森; 蔡国强; 吴念慈; 李卫星. 丙氨酸自由基的推拉效应[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 765-768
20. 王海; 陈德文; 徐广智. 苯酚类化合物在超微粒表面光解自由基的研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 597-603
21. 黄树坤; 陈林生; 谢乃贤; 汪凤珍; 刘国根. 对甲苯磺酰胺电还原过程的电化学-ESR研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 662-665
22. 马玉新; 卢祥生; 王连顺; 陈荣梯. 氮杂冠醚与碱金属离子配位反应的研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06):

扩展功能

本文信息

PDF(1076KB)

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

▶ 自由基

▶ 构象

▶ 超精细结构

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 陈波珍

▶ 黄明宝

▶ 颜达予

23. 陈从香;冉琴;俞书勤;马兴孝.Ar、NO和CHBr₃对电子激发态CH的淬灭[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 363-366
24. 倪晋智;李书涛;储焰南;胡义华;曹德兆.CO($\sigma^3\pi$)与CN($X^2\Sigma^+$)的能量转移反应[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 19-21
25. 尚海蓉;余赓;应立明;高盘良;赵新生. \bar{A}^3E 态CH₃N自由基的稳定性[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 594-596
26. 毛友钢;郑莹光;王国斌;沈家骢.聚合反应增长自由基ESR谱的交替线宽现象研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 610-616
27. 郑妍;查东;李来才.CF₃O₂自由基和NO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 156-160
28. 李永红;彭以元;王姓;洪三国.AM1法研究取代乙烯与环己-1, 3-二烯热加成[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 532-536
29. 刘朋军;杜奇石;常鹰飞;荣顺.HNCS与CH₂($X^2\Pi$)反应微观动力学的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1347-1351
30. 汪志祥;刘若庄;黄明宝.CH自由基与O₂反应得从头算研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 385-388
31. 孟祥举;肖丰收.温和条件下新型铜基磷酸盐在氧化反应中的高催化活性[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 939-945
32. 彭静;朱铁才;翟茂林;乔金梁;魏根拴. \cdot OH对聚二甲基硅氧烷乳液辐射效应的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 873-877
33. 刘海波, 仇永清, 孙世玲, 孙晓娜, 苏忠民.双咪唑苯和双三唑苯及其衍生物非线性光学性质的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 120-124
34. 朱承驻;张仁熙;房豪杰;赵庆祥;侯惠奇.355 nm光照下大气液相中HNO₂与C₆H₅Cl的反应机理[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 367-371
35. 朱承驻;张仁熙;郑光明;欧阳彬;赵庆祥;侯惠奇.瞬态吸收光谱研究苯与H₂O₂水溶液的反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1112-1117
36. 潘丹霞;于勇;董文博;郑璐;卢霄;姚思德;侯惠奇.CCl₄的光解微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1099-1103
37. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.CIO与CIO自由基反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 166-172
38. 张智强;胡长进;裴林森;陈从香;陈旸.NCO自由基与SO₂、CS₂反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 535-539
39. 李来才;钱一鸣;朱元强;田安民.CH₃+HNCO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 228-232
40. 田燕;何天敬;陈东明;刘凡镇. \cdot OH自由基与CH₃CN反应机理及动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 587-594
41. 袁焜;刘艳芝;吕玲玲.气相中开壳型(CH₃)₂S(O)...HOO红移氢键复合物的结构与性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 861-867
42. 王云海;刘永东;罗云敬;钟儒刚.过氧亚硝酸与酪氨酸的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1207-1213
43. 俞庆森;蔡国强.取代基对氮和氧自由基稳定性影响的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 516-520
44. 蔡国强,俞庆森,朱龙观,吴念慈.取代基对氮自由基稳定性影响的*ab initio*研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 532-536
45. 赵彦英;刘亚军;郑世钧;黄明宝;孟令鹏.戊烯自由基阳离子的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1081-1086
46. 王素华;陈德文.对氨基苯磺酸钠的光化学动力学的ESR研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 458-462
47. 黄存顺;朱志强;冉琴;陈从香;陈旸.C₂H₃+NO₂反应速率常数的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 51-54
48. 刘云珍;胡长进;裴林森;陈从香;马兴孝.CCl₂自由基与H₂O分子反应动力学研究 [J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 481-486
49. 孟祥光;李建梅;庞钦辉;朱杰;臧蓉蓉;曾宪诚.CTAB对H₂O₂氧化抗坏血酸反应动力学的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 283-286
50. 司维江;嵇淑萍;居冠之.NH+O₃→ONH+O₂反应热力学和动力学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 974-977
51. 张群;束继年;周晓国;戴静华;李全新.CF自由基5pπE₂Πr(v'=1)←X₂Π(v''=0)带的转动分析[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 865-868
52. 陈丽涛;陈光巨;傅孝愿.乙烯基炔与-氧化氮反应机理的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1001-1006
53. 刘俊伶;尚静;王佩怡;李来才;田安民.CH₃CHF自由基与HNCO反应机理的理论[J]. 物理化学学报, 2006,22

(08): 921-925

54. 储高升; 张志成; 张曼维; 姚思德; 王文锋; 林念芸. 磷酸化与非磷酸化氨基酸水溶液的脉冲辅解研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(12): 1114-1118

55. 王素华, 陈德文. 对位取代苯磺酸钠在溶液及界面的光反应研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 315-319

56. 袁焜; 刘艳芝; 朱元成; 张继. 气相中 O_3 与HSO自由基间的氢键复合物[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 2065-2070

57. 秦艳; 黄丽; 董文博; 房豪杰; 侯惠奇. 355 nm光诱发的水体中 HNO_2 与 C_6H_5Br 交叉反应机理[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1677-1682

58. 延辉; 苑世领; 刘成卜. 烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(01): 8-12

59. 侯若冰; 李伟伟; 沈星灿. 8-羟基鸟嘌呤自由基的开环反应机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(02): 269-274

60. 陈克正; 张志琨; 崔作林; 杨大智. 纳米纤维状微结构乙炔聚合物的相变研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 311-316

61. 马先勇; 姚思德; 王文锋; 左志华; 林念芸. 胞嘧啶水溶液体系辐解的瞬态产物研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(09): 833-837

62. 谭晓峰; 董峰; 陈宏; 李学初. 直流放电制备CN自由基及其LIF探测[J]. 物理化学学报, 1998, 14(07): 664-668

63. 裴林森; 金瑾; 高义德; 陈从香; 陈旻. CH自由基共振增强多光子电力光谱[J]. 物理化学学报, 2000, 16(04): 374-378

64. 张先炎炎; 许新胜; 陆同兴; 崔执凤; 李海洋. 葱醌/氢给体/氮氧自由基的瞬态电子自旋极化[J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 346-349

65. 花建丽; 宋才生; 王光辉; 蔡明中. ESR自旋稳定化技术在漆酶化学中的应用[J]. 物理化学学报, 1999, 15(02): 173-177

66. 沈关林; 张敏; 董峰; 李学初; 王秀岩. $NH_2(A^2A_1, 090, 4_{23})$ 的电子猝灭和转动态-态传能[J]. 物理化学学报, 2001, 17(09): 840-844

67. 郑旭煦; 胥江河; 林治华; 谭世语. OH与TCE和PCE加成中间体消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(12): 1080-1085

68. 陈波珍; 黄明宝; 苏红梅; 孔繁敖. CH_2+O_2 反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(10): 869-872

69. 陈波珍; 黄明宝. HCS自由基超精细结构的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(08): 673-675

70. 陈平; 郑小明; Meyer S; Temps F. FTIR研究HCO自由基与 NO_2 反应的动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 1043-1047

71. 侯华; 王宝山; 顾月姝. F+NCO反应的机理和动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(06): 517-521

72. 邝平先; 陈波珍; 黄明宝. $C(^3P)$ 与 H_2S 反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 389-392

73. 毛文涛; 李强; 苏红梅; 孔繁敖. ClCOCO自由基的研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 673-675

74. 陆同兴; 许新胜; 崔执凤. 激光光解苯醌自由基质子交换的TRESR研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(03): 268-271

75. 胡海泉; 刘成卜. 双自由基 CF_2 与 O_3 的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998, 14(12): 1104-1107

76. 陈志军; 彭凯; 方少明; 田俊峰; 李丁丁; 贾陆军; 冒小峰. Fe_3O_4 表面原位引发可控/“活性”聚合制备磁性聚苯乙烯纳米粒子[J]. 物理化学学报, 2007, 23(03): 349-354

77. 王云海; 刘永东; 罗云敬; 张伟; 钟儒刚. 过氧亚硝酸与苯酚的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1266-1271

78. 李红志; 王学斌; 孔繁敖; 朱起鹤. 激光光解 $CHBr_3+O_2$ 体系的FTIR-TRS研究[J]. 物理化学学报, 1993, 9(04): 452-454

79. 李卫星; 周洵钧; 蔡国强. α -氯甲硫醚自由基的构型和推拉效应[J]. 物理化学学报, 1993, 9(03): 402-405

80. 陈从香; 王学军; 马兴孝. $CH(A^2\Delta)$ 被 O_2 , CS_2 和环乙烷猝灭的速度常数[J]. 物理化学学报, 1993, 9(03): 398-401

81. 陆庆正; 陶李; 俞书勤; 孔繁敖. 红外多光子解离亚磷酸三甲酯产生可见及紫外荧光的研究[J]. 物理化学学报, 1993, 9(02): 238-241

82. 马思渝; 丁燕波; 傅孝愿. 咪唑与单线态氧(1O_2)1,2-环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1992, 8(02): 181-185

83. 李瑞芳; 尚贞锋; 许秀芳; 王贵昌. 扶手椅型单壁碳纳米管生长机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(11): 1388-1392

84. 冯良波; 汪汉卿. α -生育酚中性自由基的EPR考察[J]. 物理化学学报, 1992, 8(05): 681-684

85. 赵炜; 李长林. 激光引发的氯自由基与1, 2-二氯乙烷的反应研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(03): 358-361

86. 张仁熙;黄丽;房豪杰;董文博;侯惠奇. 355 nm光作用下C₆F₆-HNO₂水溶液的反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 152-156
87. 赵英国;周晓国;于锋;戴静华;刘世林. 氧负离子自由基与苯的反应机理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1095-1100
88. 王焕霞, 刘守信, 房喻, 韩晓宇, 张飒. 聚(*M,N*-二乙基丙烯酰胺)的合成及盐对其水溶液温敏性的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1911-1915
89. 牟博, 雷忠利, 杨红, 李娜. PS-*b*-PNIPAM/Ag复合微粒的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2399-2403
-