

研究简报

5-氨基-4-乙氧羰基-3-(4,6-二甲基嘧啶-2-氨基)-1H-吡唑甲基化的量子化学研究

任雪玲<sup>\*1</sup>, 胡方中<sup>2</sup>, 吴超<sup>2</sup>, 陈洵<sup>1</sup>, 杨华铮<sup>2</sup>

(<sup>1</sup>天津大学化工学院 天津 300072)

(<sup>2</sup>南开大学元素有机化学研究所 天津 300071)

收稿日期 2005-8-2 修回日期 2005-11-16 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 5-氨基-1H-吡唑的甲基化作用通常会生成一对产物, 但5-氨基-4-酯基-3-(4,6-二甲基嘧啶-2-氨基)-1H-吡唑和碘甲烷作用只得到了一个产物. 使用从头计算方法对这种例外进行了量子化学解释, 同时对甲基化反应的唯一产物运用密度泛函理论等量子化学方法进行结构优化及研究.

**关键词** [甲基化](#) [5-氨基-1H-吡唑](#) [从头计算](#) [几何构型优化](#)

分类号

**A Theoretical Study on Methylation of 5-Amino-4-ethoxycarbonyl-3-(4,6-dimethyl-pyrimidin-2-ylamino)-1H-pyrazole**

REN Xue-Ling<sup>\*1</sup>, HU Fang-Zhong<sup>2</sup>, WU Chao<sup>2</sup>, CHEN Xun<sup>1</sup>, YANG Hua-Zheng<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072)

(<sup>2</sup> Institute of Elemento-Organic Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071)

**Abstract** In general, the methylation of 5-amino-1H-pyrazoles results in a pair of isomers obtained, while 5-amino-4-ethoxycarbonyl-3-(4,6-dimethyl-pyrimidin-2-ylamino)-1H-pyrazole was treated with CH<sub>3</sub>I, only one primary product was obtained, which was explained by means of *ab initio* calculations. In this article, the geometrical conformation of the only one product optimized by calculation method was discussed.

**Key words** [methylation](#) [5-amino-1H-pyrazole](#) [ab initio method](#) [geometry optimization](#)

DOI:

通讯作者 任雪玲 [drs1998@126.com](mailto:drs1998@126.com).

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“甲基化”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [任雪玲](#)
- 
- [胡方中](#)
- [吴超](#)
- [陈洵](#)
- [杨华铮](#)