

研究论文

双取代铵氧化物(R₂HNO)与双取代羟胺(R₂NOH)的相互转换机制的量子化学研究

石国升 丁益宏*

(吉林大学理论化学研究所 理论化学计算国家重点实验室 长春 130023)

收稿日期 2008-1-11 修回日期 2008-2-29 网络版发布日期 2008-11-28 接受日期 2008-7-9

摘要

在B3LYP/6-311++G(d,p)水平下,首次对一系列双取代铵氧化物(R₂HNO)与双取代羟胺(R₂NOH) [R=CH₃, NH₂, OH, F, CH₂CH₃, CH(CH₃)₂, C(CH₃)₃]同分异构体的相互转换机制进行了理论计算研究,并与已知的H₃NO和H₂NOH进行了比较.结果表明,相对于双取代羟胺(R₂NOH),按照H<CH₃<NH₂<OH<F的顺序,增加取代基R的电负性有助于提高双取代铵氧化物(R₂HNO)的热力学和动力学稳定性.此外,对烷基取代基R [R=CH₃, CH₂CH₃, CH(CH₃)₂, C(CH₃)₃],其空间位阻越大越能增加双取代铵氧化物(R₂HNO)的热力学稳定性,动力学稳定性也有相应增加,但不显著.对所研究的7种取代基[R=CH₃, NH₂, OH, F, CH₂CH₃, CH(CH₃)₂, C(CH₃)₃],R₂HNO向R₂NOH转换的能垒介于27.0~56.3 kcal/mol之间,表明在气相条件下极有可能观测到双取代铵氧化物(R₂HNO).

关键词 [R₂HNO](#) [R₂NOH](#) [同分异构体](#) [热力学稳定性](#) [动力学稳定性](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

丁益宏 yhdd@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页:

石国升 丁益宏*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(340KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“R₂HNO”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [石国升 丁益宏*](#)