

## 取代基对氮自由基稳定性影响的 *ab initio* 研究

蔡国强, 俞庆森, 朱龙观, 吴念慈

浙江大学化学系 | 杭州 310027 | 杭州大学化学系 | 杭州 310028

### 摘要:

用UHF / 4-31G基组, 全构型优化, 研究了九个氮自由基NHR (R=CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>, CCl<sub>3</sub>, CN, NH<sub>2</sub>, CHO, OH, COOH, F) 的构型和稳定化能 $\Delta E$ , 它们的 $\Delta E$ 分别为25. 24, -38. 53, -20. 59, 21. 46, 19. 96, 58. 82, 73. 69, 31. 75, 63. 85kJ·mol<sup>-1</sup>, 表明, 除CF<sub>3</sub>, CCl<sub>3</sub>以外, 其余七个取代基对氮自由基起稳定化作用.

关键词: 氮自由基 *ab initio*计算 稳定化能

收稿日期 1994-05-30 修回日期 1994-12-01 网络版发布日期 1995-06-15

通讯作者: 蔡国强 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 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

### 扩展功能

#### 本文信息

[PDF\(762KB\)](#)

#### 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

- ▶ [氮自由基](#)
- ▶ [ab initio计算](#)
- ▶ [稳定化能](#)

#### 本文作者相关文章

- ▶ [蔡国强](#)
- ▶ [俞庆森](#)
- ▶ [朱龙观](#)
- ▶ [吴念慈](#)