

研究论文

2-(氟代己酰胺基)-苯甲醛与NH<sub>3</sub>反应生成3-(1-亚胺基氟烷基)-1H-喹啉-2-酮的反应机理理论研究

张福兰<sup>a,b</sup> 李来才<sup>\*a</sup> 徐伯华<sup>b</sup> 田安民<sup>c</sup>

(<sup>a</sup>四川师范大学化学与材料学院 成都 610066)

(<sup>b</sup>长江师范学院化学系 涪陵 408003)

(<sup>c</sup>四川大学化学学院 成都 610064)

收稿日期 2008-5-6 修回日期 2008-7-1 网络版发布日期 2009-1-14 接受日期 2008-9-1

摘要

采用密度泛函方法(DFT)研究了2-(氟代己酰胺基)-苯甲醛与NH<sub>3</sub>的微观反应机理. 在B3LYP/6-31G\*水平上优化了反应物、过渡态、中间体及产物的几何构型, 通过振动分析确认了过渡态的结构, 并用内禀反应坐标方法(IRC)确认反应途径. 应用分子中的原子理论(AIM)分析了这些物质的成键特征. 报道了可能的反应通道, 其中

Re→TS1→

IM1→TS2→IM2→TS3→IM3→TS4→IM7→TS11→IM9→TS12→IM10→TS13→IM11→TS14→P1具有相对较低的活化能, 是反应的主要通道, 理论预测的主要产物与实验吻合. 采用连续介质模型(PCM)方法研究了反应体系的溶剂化效应, 结果表明反应过程中各物质的能量比气相要低. 溶剂化效应使转化能垒有一定程度的升高.

关键词

[2-\(氟代己酰胺基\)-苯甲醛](#) [3-\(1-亚胺基氟烷基\)-1H-喹啉-2-酮](#) [反应机理](#) [溶剂化效应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李来才 [lilcmail@163.com](mailto:lilcmail@163.com)

作者个人主页:

张福兰<sup>a</sup>; 李来才<sup>\*a</sup>; 徐伯华<sup>b</sup> 田安民<sup>c</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (1085KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (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 “](#)

[2-\(氟代己酰胺基\)-苯甲醛” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张福兰, 李来才, 徐伯华, 田安民](#)