

苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算

李巍; 荣华; 吴新民; 陈中元

北京石油化工学院化学工程学院, 北京 102617

摘要:

以苏氨酸(Thr)和对甲苯磺酸(p-TsOH)为原料, 用一步法在微波反应仪中合成了离子液体苏氨酸对甲苯磺酸盐(Thr-TsOH), 并采用对甲苯磺酸法一步制得其甲酯和乙酯化合物ThrC1-TsOH和ThrC2-TsOH. 对合成的离子液体的理化性质进行了表征, 它们均具有较低的熔点(低于100 °C), 但热稳定性相对较差. 结合量化计算理论方法初步探索了氨基酸酯化对熔点的影响. 采用DFT的B3LYP/6-311++G**方法对苏氨酸对甲苯磺酸及其甲酯、乙酯化合物3种分子进行构型优化及振动频率分析, 通过对分子中阴、阳离子间结合能的研究发现, 酯化不仅能减弱分子间氢键相互作用, 还能明显减弱分子内离子间相互作用, 从而降低体系的熔点.

关键词: 苏氨酸 离子液体 微波合成 酯化 量子化学 DFT

收稿日期 2007-10-23 修回日期 2008-01-25 网络版发布日期 2008-03-24

通讯作者: 荣华 Email: liwei77@bipt.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 赵长伟; 马沛生; 朱春英; 赵树志. L-苏氨酸在糖及维生素C水溶液中的体积性质[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 15-20
2. 马伟; 孙登明. 聚L-苏氨酸修饰电极对多巴胺和肾上腺素的电催化氧化[J]. 物理化学学报, 2007, 23(03): 332-336

扩展功能

本文信息

PDF(390KB)

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

- ▶ 苏氨酸
- ▶ 离子液体
- ▶ 微波合成
- ▶ 酯化
- ▶ 量子化学
- ▶ DFT

本文作者相关文章

- ▶ 李巍
- ▶ 荣华
- ▶ 吴新民
- ▶ 陈中元