

甲亚胺1,1-脱氢反应途径的量子拓扑研究

蔡新华,孟令鹏,郑世钧,陈彬,赵成大

河北师范学院化学系;东北师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 根据甲亚胺($\text{H}_2\text{C}=\text{NH}$)1,1-脱氢生成CNH的IRC途径,用ab initio4-31G₁基组计算了反应进程中的各点,着重从量子拓扑学的角度讨论了化学键的性质、强度、原子的电子集居等诸拓扑指标的变化,直观、清晰、定量地描述了H(1)-C键断裂,H(1)-H(2)键形成及从母体脱除的协同非同步过程.该方面的研究未见文献报道.

关键词 [量子化学](#) [化学键](#) [电子密度](#) [从头计算法](#) [矩阵](#) [拓扑](#) [亚胺](#) [甲胺](#)

分类号 [0641](#) [0621.16](#)

Quantum topological study on the reaction path of 1,1-dehydrogenation of methylenimine

CAI XINHUA,MENG LINGPENG,ZHENG SHIJUN,CHEN PING,ZHAO CHENGDA

Abstract The IRC path on the hypersurface of the title reaction of H(1)CH(2)=NH (I), to give $:\text{C}=\text{NH}$, is found and the ab initio (4-31G) calcns. of the change in quantum topolog. properties (e.g., the characteristics and strengths of bonds, electronic populations of atoms, etc.) provide a quant. description of the H(1)-C bond cleavage, the formation and departure of H(1)-H(2) from I. The title reaction is cooperative but not synchronous.

Key words [QUANTUM CHEMISTRY](#) [CHEMICAL BONDS](#) [ELECTRON DENSITY](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MATRICES](#) [TOPOLOGY](#) [IMINE](#) [METHANAMINE](#)

DOI:

通讯作者

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“量子化学”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [蔡新华](#)
- [孟令鹏](#)
- [郑世钧](#)
- [陈彬](#)
- [赵成大](#)