

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 论文

### 亚硝基化合物与甲醛的反应机理和溶剂效应的理论研究

郑天龙, 黎安勇

西南大学化学化工学院, 重庆 400715

#### 摘要:

采用密度泛函方法B3LYP/6-311++G(*d,p*)研究了亚硝基苯C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>—NO和2-甲基-2-亚硝基丙烷(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C—NO与甲醛分别在气相和溶剂中的反应机理. 在气相中均找到两条反应通道, 即协同机理和分步机理, 均生成实验产物羟肟酸, 而且分步机理均为优势通道; 除2-甲基-2-亚硝基丙烷的反应没有协同途径外, 在溶剂中反应机理与气相中的类似. 采用导电极化连续介质模型分别研究了在乙腈与水溶液中反应的溶剂化效应, 发现这些溶剂可降低反应的活化能, 但降低的程度比较小, 反应速率变化不大.

关键词: 密度泛函理论方法; 亚硝基苯; 2-甲基-2-亚硝基丙烷; 甲醛; 溶剂效应; 极化连续介质模型

### Theoretical Studies on Mechanism and Solvent Effects of Reactions of Nitrosobenzene and 2-Methyl-2-nitrosopropane with Formaldehyde

ZHENG Tian-Long, LI An-Yong\*

School of Chemistry and Chemical Engineering, Southwest University, Chongqing 400715, China

#### Abstract:

The DFT method B3LYP/6-311++G(*d,p*) was used to study mechanism of reactions of nitrosobenzene and 2-methyl-2-nitrosopropane with formaldehyde in gas phase and solvents. In gas phase, there are two reaction paths, the concerted and stepwise mechanisms, both of which produce the experimental product, hydroxamic acid; the stepwise mechanism is predominant. The solvent effects were studied with the conductor-like polarizable continuum model respectively in the solvents acetonitrile and water, and we found that the solvent effects reduce the activation energy, but the reduction is small, these reactions are not sensitive to the solvent polarity.

Keywords: Density function theory method; Nitrosobenzene; 2-Methyl-2-nitrosopropane; Formaldehyde; Solvent effect; Polarizable continuum model

收稿日期 2008-05-06 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20873013)资助.

通讯作者: 黎安勇, 男, 博士, 教授, 主要从事量子化学研究. E-mail: aylifnsy@swu.edu.cn

作者简介:

#### 参考文献:

[1]Pilepic' V., Ur ic' S.. J. Mol. Struct.(Theochem.) [J], 2001, 538: 41—49

[2]Ur ic' S.. Helv. Chim. Acta [J], 1993, 76: 131—138

[3]Musser J. H., Kreft A. F., Bender R. H. W., et al.. J. Med. Chem. [J], 1990, 33(1): 240—245

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (514KB)

[HTML全文]

[\({article.html\\_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

密度泛函理论方法; 亚硝基苯; 2-甲基-2-亚硝基丙烷; 甲醛; 溶剂效应; 极化连续介质模型

本文作者相关文章

PubMed

[4]Crunbliss A. L.. Coord. Chem. Rev.  
[J], 1990, 105: 155—179

[5]Corbett M. D., Corbett B. R.. J. Org. Chem.  
[J], 1980, 45: 2834—2839

[6]Kronja J., Matijevit S., UrSiC S.. J. Chem. Soc., Chem. Commun.  
[J], 1987: 463

[7]Pilepic' V., Ur ic' S.. Tetrahedron Lett.  
[J], 1994, 35: 7425—7428

[8]Ur ic' S., Lovrek M., Vinkovic' Vrek I., et al.. J. Chem. Soc., Perkin Trans.  
[J], 1999, 2: 1295—1297

[9]Moss R. A., Zheng F., Sauers R. R., et al.. J. Am. Chem. Soc.  
[J], 2001, 123: 8109—8116

[10]Bader R. W.. Atoms in Molecules: A Quantum Theory  
[M], Oxford: Clarendon Press, 1990

[11]Reichardt C.. Solvent Effects in Organic Chemistry  
[M], New York: Verlag Chemie Weinheim, 1979

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="5854"/>