

苯乙酮缩氨基脲类化合物及其正负离子基的氮氢键的断裂能

赵永昱, 还振威, 程津培

南开大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文利用热力学循环原理,由苯乙酮缩氨基脲类化合物的酸性解离常数 $[pK_a(HA)]$ 和相应的氧化还原电位 $[E_{ox}(HA), E_{red}(HA)$ 和 $E_{ox}(A^-)]$ 求得了表征自由基热力学稳定性的均裂键能(BDE)

及反映正负离子基断裂方式与能量的 $pK_a(HA^+), BDE(HA^+), \Delta G^{\ddagger}(H^+)(A)$,对所得结果的取代基效应进行了讨论

关键词 [取代基效应](#) [缩氨基脲 P](#) [氧化还原电位](#) [自由基](#) [离解常数](#) [均裂键能](#) [热力学稳定性](#) [离子基](#)

分类号 [0642](#)

Cleavage energies of nitrogen-hydrogen bonds in para-substituted acetophenone semicarbazones and corresponding radical ions

ZHAO YONGYU, HAI ZHENWEI, CHENG JINPEI

Abstract BDE, $pK_a(HA^+)$, $BDE(HA^-)$ and $DGH^-(A)$ for para-substituted acetophenone semicarbazones 4-RC₆H₄C(:NNHCONH₂)Me were estimated from thermodyn. cycles by combining their equilibrium acidities $[pK_a(HA)]$ with the appropriate electrode potential data $[E_{ox}(HA), E_{red}(HA)$ and $E_{ox}(A^-)]$. The results were discussed in terms of the substituent effects.

Key words [SUBSTITUENT EFFECT](#) [SEMICARBAZONE P](#) [OXIDATION-REDUCTION POTENTIAL](#) [FREE RADICALS](#) [DISSOCIATION CONSTANT](#) [THERMODYNAMIC STABILITY](#) [ION-RADICAL \(=RADICAL ION\)](#)

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“取代基效应”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [赵永昱](#)

· [还振威](#)

· [程津培](#)