

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期末報告

密度泛函數理論(DFT)在一些重要化學系統的應用性

計畫類別：個別型
計畫編號：NSC 100-2113-M-040-005-
執行期間：100年08月01日至101年10月31日
執行單位：中山醫學大學應用化學系(所)

計畫主持人：賴金宏

公開資訊：本計畫涉及專利或其他智慧財產權，1年後可公開查詢

中華民國 101 年 12 月 27 日

中文摘要：在這項研究中，我們以幾種 DFT，MP2，以及 BD (T) 這些計算方法計算兩個 diaminocarbenes (1, 2) 和一個 diamidocarbene (3) 的 1, 2-氫轉移反應。為了研究碳烯基和過渡金屬之間的 pi-相互作用之重要性，霍布斯和他的同事期望能合成最低未佔據分子軌道之能量較低的 NHCs。將一個草酰胺基團引入雜環骨幹，他們發現產生的碳烯基相較於平常 NHCS 而言，具有較高的親電性。根據我們的結果，1, 2-氫轉移反應，N, N'-diamidocarbene 相較於 diaminocarbenes 應該是更穩定的。

中文關鍵詞：氮，氮雙醯胺碳烯基，動力學穩定性，1, 2-氫轉移反應

英文摘要：In this study, we performed several DFT, MP2, and BD(T) calculations on the 1, 2-H shift reactions of two diaminocarbenes (1, 2) and a diamidocarbene (3). In order to study the importance of pi-interactions between carbenes and transition metals, Hobbs and co-workers focused on the synthesis of NHCs with reduced-energy lowest unoccupied molecular orbitals. By introducing an oxalamide moiety into the heterocyclic backbone, they found the resulting carbene possessed higher electrophilicity than usual NHCs. According to our results, the N, N'-diamidocarbene should be more stable than the diaminocarbenes with respect to the 1, 2-H shift reaction.

英文關鍵詞：N, N'-diamidocarbene, kinetic stability, 1, 2-H shift reaction

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫

期中進度報告

期末報告

密度泛函數理論(DFT)在一些重要化學系統的應用性

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC 100-2113-M-040-005-

執行期間：2011年08月01日至2012年10月31日

執行機構及系所：中山醫學大學應用化學系

計畫主持人：賴金宏

共同主持人：

計畫參與人員：賴金宏

本計畫除繳交成果報告外，另含下列出國報告，共0份：

移地研究心得報告

出席國際學術會議心得報告

國際合作研究計畫國外研究報告

處理方式：除列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

中 華 民 國 101 年 12 月 27 日

國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以 100 字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

論文：已發表 未發表之文稿 撰寫中 無

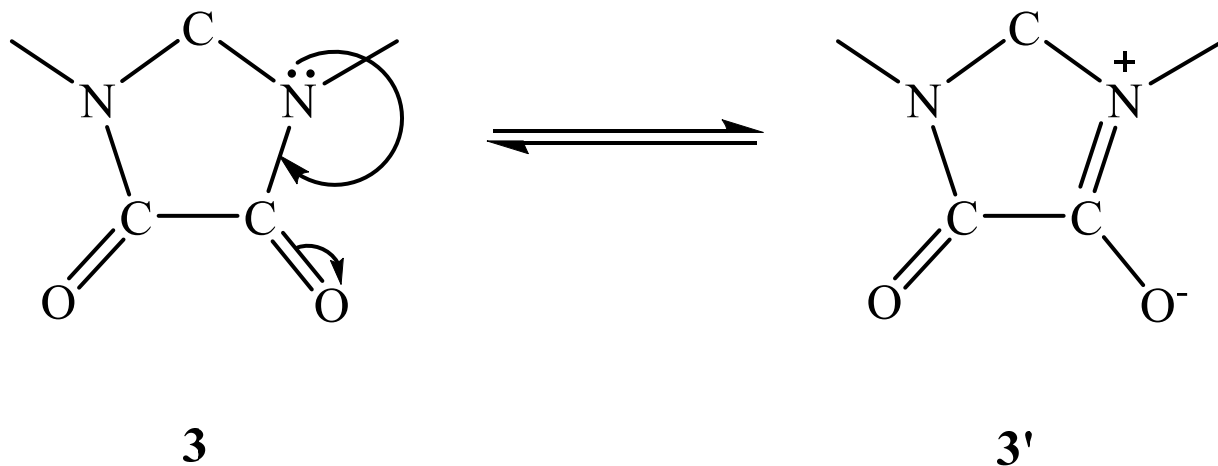
專利：已獲得 申請中 無

技轉：已技轉 洽談中 無

其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以500字為限）

在執行這個計畫期間，我們寫了三篇有關的論文，有兩篇已經分別投至 RSC Advances 以及 Computational and Theoretical Chemistry，目前稿件還在受審當中。第三篇論文目前已經完稿請人做英文編修當中，預計在 12 月 28 日會投至 Journal of Theoretical and Computational Chemistry 這本期刊。由於目前已經發現氮，氮雙醯胺碳烯基 (N,N'-diamidocarbene) 在合成上有很大的用途。比如從 Bielawski 等人的實驗結果可以發現氮，氮雙醯胺碳烯基是一個雙性 (ambiphilic) 分子，它既是良好的親核劑 (nucleophile) 同時它也是良好的親電子劑 (electrophile)。¹ 氮，氮雙醯胺碳烯基與氮-雜環碳烯基 (N-heterocyclic carbene) 不同點在於在氮-雜環碳烯基中，氮上的孤對電子 (lone pair) 與碳烯基中心的空 p 軌域之間有很強的作用力，然而在氮，氮雙醯胺碳烯基中，存在著一個共振形式



這個共振將會減弱氮上的孤對電子 (lone pair) 與碳烯基中心的空 p 軌域之間的作用力。基於此，我們就嘗試從計算化學的角度來比較這兩種碳烯基的差異性。相信我們的計算結果，將會使人們對於氮，氮雙醯胺碳烯基之電子性質有更深的了解。

參考資料:

1. Y.-G. Lee, J. P. Moerdyk and C. W. Bielawski, J. Phys. Org. Chem., 2012, DOI: 10.1002/poc.3004.

[Main Menu](#) → [Author Dashboard](#)

You are logged in as Chin-Hung Lai

Dashboard

- To submit a new manuscript, click on the "Submit a Manuscript" link below. [RSC templates](#) are available to help you format your submission.
- Clicking on the various manuscript status links under "My Manuscripts" will display a list of all the manuscripts in that status at the bottom of the screen.
- To continue a submission already in progress, click the "Continue Submission" link in the "Unsubmitted Manuscripts" list.
- To continue a revision that is already in progress, click the "Revised Manuscripts in Draft" queue under My Manuscripts and click the "Continue Submission" link.

Now available - new article templates

We have introduced slightly revised templates for all our article types. This means that the citation information will be much more visible to readers, both online and in print, so should facilitate wider readership of your work. Make sure you use the [latest templates](#) when submitting your next article.

My Manuscripts

- 0 [Unsubmitted Manuscripts](#)
- 0 [Resubmitted Manuscripts in Draft](#)
- 0 [Revised Manuscripts in Draft](#)
- 1 [Submitted Manuscripts](#)
- 0 [Manuscripts with Decisions](#)
- 0 [Manuscripts I Have Co-Authored](#)
- 0 [Manuscripts in Appeal](#)
- 0 [Withdrawn Manuscripts](#)
- 0 [Invited Manuscripts](#)

Author Resources

[Click here](#) to submit a new manuscript

This section lists the subjects of the five most recent e-mails that have been sent to you regarding your submission(s). To view an e-mail, click on the link. To delete an e-mail from this list, click the delete link.

[RSC Advances - manuscript ID RA-ART-10-2012-022698](#) [Delete](#)
(12-Dec-2012)

[Please Submit Licence to Publish Form for RA-ART-10-2012-022698](#) [Delete](#)
(30-Oct-2012)

Submitted Manuscripts

Manuscript ID	Manuscript Title	Date Created	Date Submitted	Status
RA-ART-10-2012-022698	Theoretical Comparison of the Kinetic Stabilities of Diamino- and Diamidocarbenes in the 1,2-H Shift Reaction [View Submission]	29-Oct-2012	30-Oct-2012	<ul style="list-style-type: none"> • Under Review Licence to Publish Form submitted (30-Oct-2012) - view

top

ScholarOne Manuscripts™ v4.10.0 (patent #7,257,767 and #7,263,655). © ScholarOne, Inc., 2012. All Rights Reserved.

ScholarOne Manuscripts is a trademark of ScholarOne, Inc. ScholarOne is a registered trademark of ScholarOne, Inc.

Follow ScholarOne on Twitter

[Terms and Conditions of Use](#) - [ScholarOne Privacy Policy](#) - [Get Help Now](#)



Submissions Being Processed for Author Chin Hung Lai, Ph. D.

Page: 1 of 1 (1 total submissions)

Display 10 result

Action	Manuscript Number	Title	Initial Date
Action Links	COMPTC-D-12-00888	Computational Study of Heterodimer and Homodimer Involving an Abnormal N-Heterocyclic Carbene	Nov 07, 201

Page: 1 of 1 (1 total submissions)

Display 10 result

[<< Author Main Menu](#)

國科會補助計畫衍生研發成果推廣資料表

日期:2012/12/27

國科會補助計畫	計畫名稱: 密度泛函數理論(DFT)在一些重要化學系統的應用性
	計畫主持人: 賴金宏
	計畫編號: 100-2113-M-040-005- 學門領域: 理論與計算化學
無研發成果推廣資料	

100 年度專題研究計畫研究成果彙整表

計畫主持人：賴金宏		計畫編號：100-2113-M-040-005-					
計畫名稱：密度泛函數理論(DFT)在一些重要化學系統的應用性							
成果項目		量化			單位	備註(質化說明：如數個計畫共同成果、成果列為該期刊之封面故事...等)	
		實際已達成數(被接受或已發表)	預期總達成數(含實際已達成數)	本計畫實際貢獻百分比			
國內	論文著作	期刊論文	0	0	100%	篇	
		研究報告/技術報告	0	0	100%		
		研討會論文	1	1	100%		
		專書	0	0	100%		
	專利	申請中件數	0	0	100%	件	
		已獲得件數	0	0	100%		
	技術移轉	件數	0	0	100%	件	
		權利金	0	0	100%	千元	
	參與計畫人力 (本國籍)	碩士生	0	0	100%	人次	
		博士生	0	0	100%		
		博士後研究員	0	0	100%		
		專任助理	0	0	100%		
國外	論文著作	期刊論文	0	3	100%	篇	
		研究報告/技術報告	0	0	100%		
		研討會論文	0	0	100%		
		專書	0	0	100%	章/本	
	專利	申請中件數	0	0	100%	件	
		已獲得件數	0	0	100%		
	技術移轉	件數	0	0	100%	件	
		權利金	0	0	100%	千元	
	參與計畫人力 (外國籍)	碩士生	0	0	100%	人次	
		博士生	0	0	100%		
		博士後研究員	0	0	100%		
		專任助理	0	0	100%		

<p>其他成果 (無法以量化表達之成果如辦理學術活動、獲得獎項、重要國際合作、研究成果國際影響力及其他協助產業技術發展之具體效益事項等，請以文字敘述填列。)</p>	<p>無</p>
--	----------

	成果項目	量化	名稱或內容性質簡述
科 教 處 計 畫 加 填 項 目	測驗工具(含質性與量性)	0	
	課程/模組	0	
	電腦及網路系統或工具	0	
	教材	0	
	舉辦之活動/競賽	0	
	研討會/工作坊	0	
	電子報、網站	0	
	計畫成果推廣之參與(閱聽)人數	0	

國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以 100 字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

論文： 已發表 未發表之文稿 撰寫中 無

專利： 已獲得 申請中 無

技轉： 已技轉 洽談中 無

其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以 500 字為限）