

Quantum Chemical Calculation of the Reaction Related Phenethylpiperidone

Bowen Yang^{1,2}, Zhigang Zhao², Kaiyuan Shao¹, Wenxiang Hu^{1,3*}

¹Jingdong Xianghu Microwave Chemistry Union Laboratory, Beijing Excalibur Space Military Academy of Medical Sciences, Beijing

²College of Chemistry and Environmental Protection Engineering, Southwest University for Nationalities, Chengdu Sichuan

³Space Systems Division, Strategic Support Troops, Chinese People's Liberation Army, Beijing
Email: huwx66@163.com

Received: Jul. 9th, 2018; accepted: Jul. 27th, 2018; published: Aug. 3rd, 2018

Abstract

In this paper, the mechanism of Michael addition and Dieckmann condensation in the synthesis of phenethylpiperidone and the activity reaction of Schiff base from phenethylpiperidone were elucidated by the net electrophilic index and Wiberg bond level calculated by quantum chemistry. It has certain theoretical significance.

Keywords

Quantum Chemistry Calculation, Net Electrophilic Index, Wiberg Bond Level, Michael Addition, Dieckmann Condensation, Schiff Base

苯乙基哌啶酮相关反应量子化学计算研究

杨博文^{1,2}, 赵志刚², 邵开元¹, 胡文祥^{1,3*}

¹北京神剑天军医学科学院京东祥鹤微波化学联合实验室, 北京

²西南民族大学化学与环境保护工程学院, 四川 成都

³中国人民解放军战略支援部队航天系统部, 北京

Email: huwx66@163.com

收稿日期: 2018年7月9日; 录用日期: 2018年7月27日; 发布日期: 2018年8月3日

摘要

本文通过量子化学计算所得的净亲电指数及Wiberg键级, 阐明了苯乙基哌啶酮合成过程中的Michael加
*通讯作者。

成和Dieckmann缩合反应机理，说明了从苯乙基哌啶酮生成席夫碱的反应活性，具有一定的理论意义。

关键词

量子化学计算，净亲电指数，Wiberg键级，Michael加成，Dieckmann缩合，席夫碱

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

苯乙基哌啶酮是一类重要的有机药物合成中间体，可以合成席夫碱；其本身的合成是经过两步反应完成：Michael加成和Dieckmann缩合。本文通过量子化学计算的净亲电指数阐明了上述相关反应活性，在阐明类似化学反应活性方面具有一定的指导意义。

2. Michael加成反应的量子化学计算研究

2.1. 苯乙基哌啶酮合成中涉及到的Michael加成反应

合成苯乙基哌啶酮首先涉及到Michael加成反应(如图1)。

2.2. 通过量子化学计算来阐明其反应机理

苯乙胺与丙烯酸甲酯的反应属于Michael加成反应。经典的说法是丙烯酸甲酯的羰基上的O原子因具有强的电负性从而导致C=O键的电子转移到氧原子上，此时羰基上的C原子显正电性，从而导致临近烯烃不饱和键上的电子转移到羰基的C原子上，造成了烯烃的 β -C原子显正电性，这样有利于苯乙胺中带孤对电子的N原子去攻击，而胺基上的H原子就转移到 α -C上。由于加成反应后的产物属于仲胺分子，

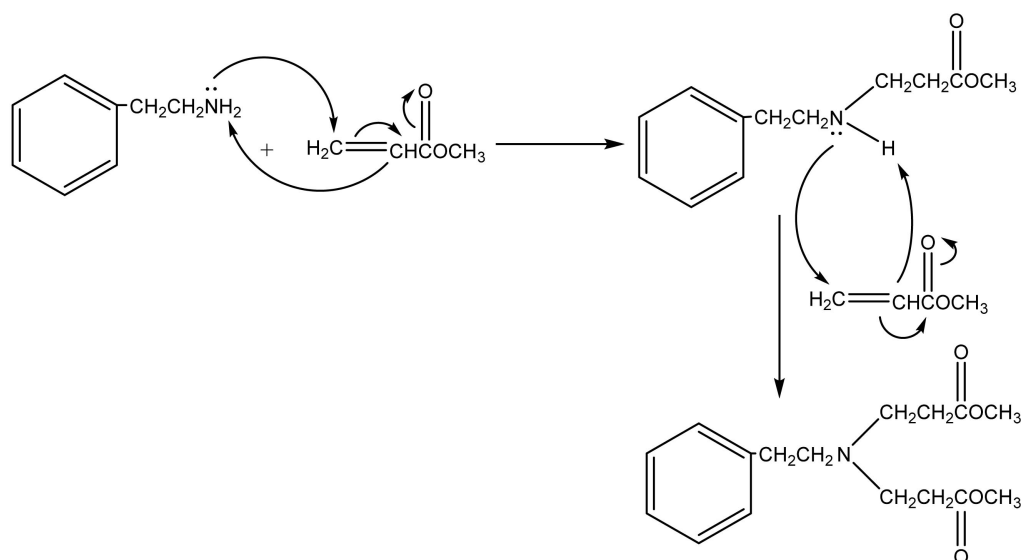


Figure 1. Michael addition reaction

图1. Michael加成反应

N 原子仍然带一孤对电子, 还可进攻丙烯酸甲酯的 β -C 原子, 从而完成的丙烯酸甲酯的双分子加成。实际实验中, 第一次加成在 30°C 左右就可进行, 而第二次加成则需要在甲醇回流下才能完成反应。本文中我们从丙烯酸甲酯反应性的角度出发, 从量子化学角度阐明这一反应过程。经量子化学反应性指数计算(见表 1), 获得丙烯酸甲酯的净亲电指数 $\Delta\omega_k^{\pm}$, 见图 2。

从计算结果来看, 1C 的净亲电指数 $\Delta\omega_{1C}^{\pm}$ 为正值, 表明 1C 具有亲电性, 而苯乙胺的 N 原子因孤对电子存在具有很强的亲核性; 2C 的净亲电指数 $\Delta\omega_{2C}^{\pm}$ 为负值, 故 2C 具有亲核性, 可获得体系中游离的 H^+ 。故苯乙胺加成在乙烯基的 1C 上。

3. Dieckmann 缩合反应的量子化学计算研究

3.1. 苯乙基哌啶酮合成中涉及到的 Dieckmann 缩合反应

Dieckmann 反应是分子内的 Claisen 缩合反应。经典的说法是强碱存在下夺取羰基临近的 α -C 原子上的 H 原子而形成负碳离子。此负碳离子进攻另一个羰基上的带正电性的 C 原子, 从而完成了分子内缩合反应。如下图所示为本反应中涉及到的 Dieckmann 缩合反应(如图 3)。

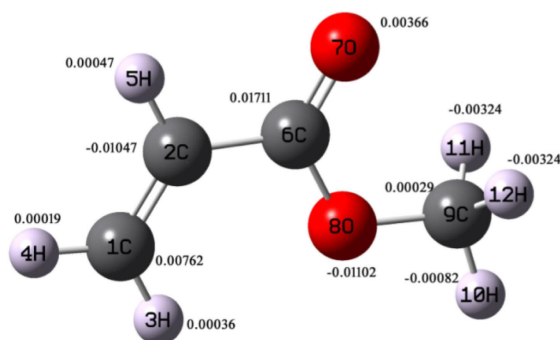


Figure 2. Methyl acrylate molecular model and its net electrophilicity index $\Delta\omega_k^{\pm}$

图 2. 丙烯酸甲酯分子模型及其净亲电指数 $\Delta\omega_k^{\pm}$ 值

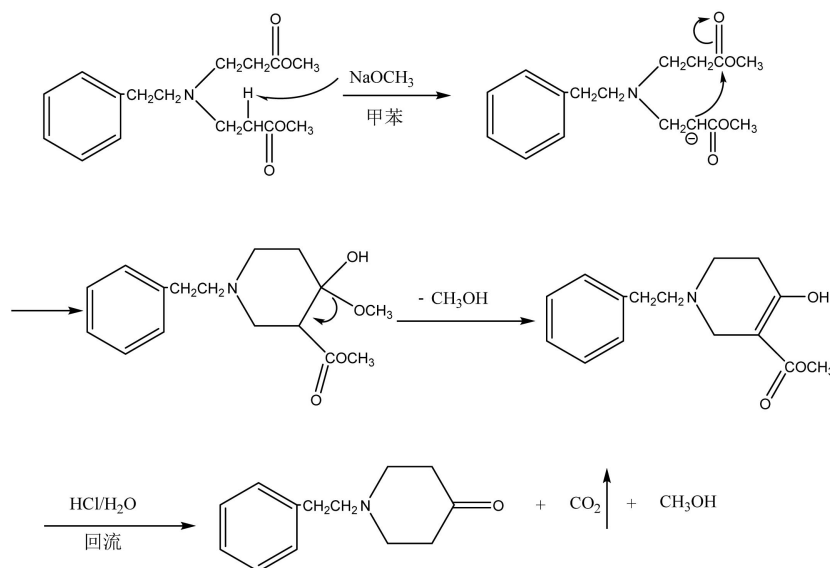


Figure 3. Dieckmann condensation reaction

图 3. Dieckmann 缩合反应

Table 1. The reactivity index results calculated by quantum chemistry for methyl acrylate
表 1. 丙烯酸甲酯量子化学反应性指数计算结果

原子序号	e_k	e_k^{-1}	e_k^{+1}	f_k^+	f_k^-	$\Delta\omega_k^\pm$
1C	-0.34332	-0.69395	-0.08197	0.35063	0.26135	0.00762
2C	-0.32815	-0.47258	-0.061	0.14443	0.26715	-0.01047
3H	0.2319	0.20163	0.258	0.03027	0.0261	0.00036
4H	0.22314	0.18238	0.26172	0.04076	0.03858	0.00019
5H	0.25117	0.20586	0.29094	0.04531	0.03977	0.00047
6C	0.77467	0.64896	0.69979	0.12571	-0.07488	0.01711
7O	-0.59953	-0.75538	-0.48657	0.15585	0.11296	0.00366
8O	-0.56308	-0.60194	-0.3845	0.03886	0.17858	-0.01192
9C	-0.30353	-0.29683	-0.31367	-0.0067	-0.01014	0.00029
10H	0.21898	0.18846	0.25907	0.03052	0.04009	-0.00082
11H	0.21888	0.19669	0.2791	0.02219	0.06022	-0.00324
12H	0.21888	0.19669	0.2791	0.02219	0.06022	-0.00324

3.2. 通过量子化学计算来阐明其反应机理

现在,我们从量子化学角度来阐明这一反应过程。经量子化学反应性指数计算,获得 N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺的分子模型,见图 4。N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺的 Wiberg 键级表,见表 2;及 N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺的净亲电指数 $\Delta\omega_k^\pm$ 见表 3。

上述 23H, 24H, 25H, 30H, 31H, 40H, 43H, 44H 等的净亲电指数 $\Delta\omega_k^\pm$ 均为正值,故都具有亲电性。当体系中存在强的亲核试剂如 $^-\text{OCH}_3$ 时,这些 H 原子都可能与 $-\text{OCH}_3$ 结合。但从 Wiberg 键级的计算结果表明,39C-40H、42C-43H、42C-44H 三个 C-H 键的键级最小,意味着这些化学键最易断裂。因此,强碱 $^-\text{OCH}_3$, 只能夺取羰基相连的 α -C 的亚甲基的 H 原子,而不是夺取酯中的甲氧基上的 H 原子,形成具有强烈亲核性能的负碳离子,从而可以有效地攻击具有亲电性的羰基(净亲电指数为正值)。

4. 苯乙基哌啶酮与苯胺、2-氟苯胺反应生成席夫碱的量子化学计算

4.1. 苯乙基哌啶酮与苯胺、2-氟苯胺反应生成席夫碱

Hugo Schiff 在 1864 年首次描述通过两个等物质的量的醛和胺的缩合反应形成 Schiff base (希夫碱),距今已 140 年,其反应机理是:由含羰基的醛、酮类化合物与一级胺类化合物进行亲核加成反应,亲核试剂为胺类化合物,其化合物结构中带有孤电子对的氮原子进攻羰基基团上带有正电荷的碳原子,完成亲核加成反应,形成中间物 α -羟基胺类化合物,然后进一步脱水形成席夫碱。

本文中席夫碱的形成过程,实际上是以芳香胺作为亲核试剂的亲核反应过程,见图 5。

我们在实验中发现,2-氟苯胺和苯胺分别与苯乙基哌啶酮形成席夫碱的过程中,2-氟苯胺比苯胺反应慢、反应时间长、产率低。

理论上,胺类化合物由于胺基 N 原子上存在孤对电子,可以形成亲核试剂,进攻含羰基化合物的羰基上的 C 原子。对于 1-苯乙基哌啶酮由于羰基的 O 原子强的电负性,导致电荷转移,从而 C 原子电子密度降低显正电性而被亲核试剂攻击。由于氟的吸电子性,导致 2-氟苯胺 N 上电子密度下降,反应活性降低。下面通过理论计算结果也充分说明这一点。

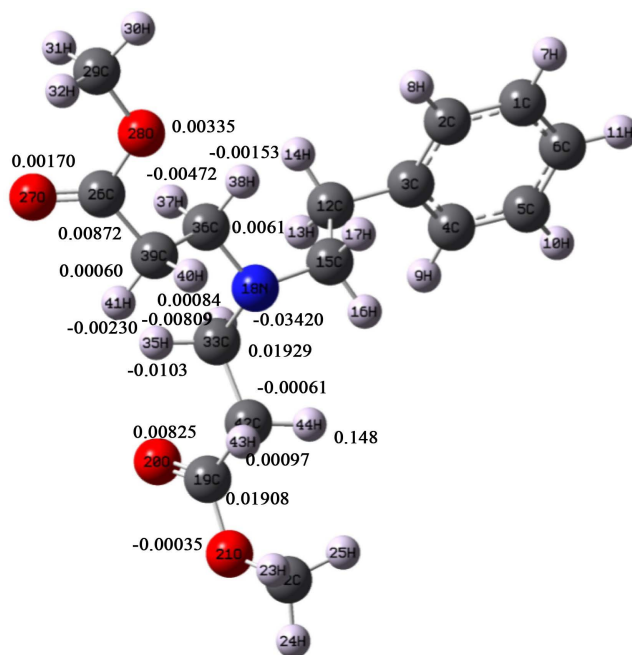


Figure 4. N,N-double (β -methyl propionate) phenylethylamine molecule model and its net electrophilicity index $\Delta\omega_k^+$
图 4. N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺的分子模型及其净亲电指数 $\Delta\omega_k^+$ 值

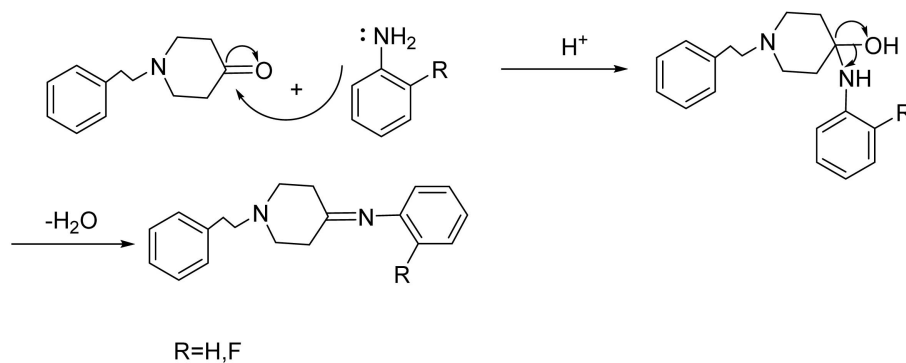


Figure 5. Schiff base formation reaction mechanism
图 5. 希夫碱形成反应机理

Table 2. N,N-double (β -methyl propionate) phenylethylamine molecule Wiberg key level
表 2. N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺的分子 Wiberg 键级表

化学键	Wiberg 键级	化学键	Wiberg 键级	化学键	Wiberg 键级
1C-7H	0.926	22C-23H	0.9462	36C-38H	0.9261
2C-8H	0.9252	22C-24H	0.9434	39C-40H	0.9049
4C-9H	0.9252	22C-25H	0.9465	39C-41H	0.9194
5C-10H	0.9259	29C-30H	0.9491	33C-34H	0.9176
6C-11H	0.9255	29C-31H	0.9491	33C-35H	0.9252
12C-13H	0.9213	29C-32H	0.9491	42C-43H	0.9034
12C-14H	0.9222	33C-34H	0.9176	42C-44H	0.9062
15C-16H	0.928	33C-35H	0.9252		
15C-17H	0.9266	36C-37H	0.9220		

Table 3. The reactivity index results calculated by quantum chemistry for N,N-double(β -methyl propionate) phenylethylamine
表 3. N,N-双(β -丙酸甲酯)苯乙胺量子化学反应性指数计算结果

原子序号	e_k	e_k^{-1}	e_k^{+1}	f_k^+	f_k^-	$\Delta\omega_k^\pm$
1C	-0.19674	-0.24419	-0.17894	0.04745	0.01780	0.00264
2C	-0.20613	-0.23403	-0.17879	0.02790	0.02734	0.00005
3C	-0.03065	-0.00503	-0.00392	-0.02562	0.02673	-0.00466
4C	-0.20685	-0.25618	-0.17756	0.04933	0.02929	0.00178
5C	-0.19696	-0.22330	-0.18178	0.02634	0.01518	0.00099
6C	-0.21193	-0.22816	-0.12178	0.01623	0.09015	-0.00658
7H	0.20562	0.18917	0.22812	0.01645	0.02250	-0.00054
8H	0.20241	0.19637	0.21515	0.00604	0.01274	-0.00060
9H	0.20246	0.19614	0.21473	0.00632	0.01227	-0.00053
10H	0.20574	0.18889	0.22818	0.01685	0.02244	-0.00050
11H	0.20642	0.18824	0.22728	0.01818	0.02086	-0.00024
12C	-0.42085	-0.42417	-0.40368	0.00332	0.01717	-0.00123
13H	0.20632	0.20435	0.22713	0.00197	0.02081	-0.00168
14H	0.20555	0.20180	0.22721	0.00375	0.02166	-0.00159
15C	-0.15240	-0.14906	-0.18596	-0.00334	-0.03356	0.00269
16H	0.18893	0.18824	0.22065	0.00069	0.03172	-0.00276
17H	0.19494	0.18384	0.23009	0.01110	0.03515	-0.00214
18N	-0.57440	-0.54290	-0.22189	-0.03153	0.35250	-0.03420
19C	0.81226	0.60038	0.80982	0.21188	-0.00244	0.01908
20O	-0.57145	-0.6928	-0.54272	0.12135	0.02873	0.00825
21O	-0.55180	-0.57134	-0.52827	0.01959	0.02348	-0.00035
22C	-0.21364	-0.20901	-0.21947	-0.00463	-0.00583	0.00011
23H	0.17450	0.15765	0.17668	0.01685	0.00218	0.00131
24H	0.19870	0.16917	0.21698	0.02953	0.01828	0.00100
25H	0.17313	0.15308	0.17242	0.02005	-0.00071	0.00185
26C	0.81287	0.72585	0.80193	0.08702	-0.01094	0.00872
27O	-0.59375	-0.65969	-0.54692	0.06594	0.04683	0.00170
28O	-0.56436	-0.60526	-0.56112	0.04090	0.00324	0.00335
29C	-0.21693	-0.21952	-0.21865	0.00259	-0.00172	0.00038
30H	0.18627	0.15706	0.19580	0.02921	0.00953	0.00175
31H	0.18693	0.16407	0.19312	0.02286	0.00619	0.00148
32H	0.18714	0.18218	0.19826	0.00496	0.01112	-0.00055
33C	-0.17043	-0.34840	-0.20906	0.17797	-0.03863	0.01929
34H	0.18817	0.22453	0.24263	-0.03636	0.05446	-0.00809
35H	0.20835	0.30511	0.23548	-0.09676	0.02713	-0.01103
36C	-0.16262	-0.19372	-0.19999	0.03110	-0.03737	0.00610
37H	0.17557	0.17195	0.23219	0.00362	0.05662	-0.00472
38H	0.20569	0.20152	0.22708	0.00417	0.02139	-0.00153
39C	-0.47520	-0.48150	-0.47566	0.0063	-0.00046	0.00060
40H	0.22785	0.20680	0.23949	0.02105	0.01164	0.00084
41H	0.22010	0.23260	0.23350	-0.01249	0.01334	-0.00230
42C	-0.50527	-0.50058	-0.50308	-0.00469	0.00219	-0.00061
43H	0.22712	0.20460	0.23871	0.02252	0.01159	0.00097
44H	0.21926	0.19522	0.22663	0.02404	0.00737	0.148

4.2. 通过量子化学计算来阐明其反应活性

从化学反应性角度解释, 由量子化学计算所获得的净亲电反应性指数(见图 6) $\Delta\omega_{26C}^{\pm} = 0.11521$, 说明 26C 具有较强的亲电性能, 易于被亲核试剂攻击; $\Delta\omega_{32O}^{\pm} = -0.11021$, 负值, 说明 32O 具有较强的亲核性能, 易于被亲电试剂攻击。详细数据见(表 4)。为了比较苯胺和 2-氟苯胺的亲核能力, 以期获得这两个化合物与哌啶酮加成反应形成席夫碱的难易程度, 因此分别对他们进行了量子化学反应性指数的计算(见图 7), 详细数据见表 5 和表 6。

Table 4. 1-phenylpiperidone quantum chemistry reactivity index

表 4. 1-苯基哌啶酮量子化学反应性指数

原子序号	e_i	e_i^{-1}	e_i^{+1}	f_i^{+}	f_i^{-}	$\Delta\omega_i^{\pm}$
1C	-0.22395	-0.24848	-0.2166	0.02453	0.00735	0.01708
2C	-0.23696	-0.35346	-0.21373	0.1165	0.02323	0.09272
3C	-0.03847	-0.04842	0.00395	0.00995	0.04242	-0.03228
4C	-0.23696	-0.35346	-0.21373	0.1165	0.02323	0.09272
5C	-0.22395	-0.24848	-0.2166	0.02453	0.00735	0.01708
6C	-0.24806	-0.26025	-0.15101	0.01219	0.09705	-0.08436
7H	0.23703	0.22416	0.26831	0.01287	0.03128	-0.01830
8H	0.23151	0.22316	0.25308	0.00835	0.02157	-0.01314
9H	0.23151	0.22316	0.25308	0.00835	0.02157	-0.01314
10H	0.23703	0.22416	0.26831	0.01287	0.03128	-0.01830
11H	0.23757	0.22069	0.26766	0.01688	0.03009	-0.01313
12C	-0.44737	-0.60866	-0.4896	0.16129	-0.04223	0.20233
13H	0.23230	0.22423	0.27429	0.00807	0.04199	-0.03372
14H	0.2323	0.22423	0.27429	0.00807	0.04199	-0.03372
15C	-0.18877	-0.26613	-0.27704	0.07736	-0.08827	0.16466
16H	0.21254	0.20488	0.27122	0.00766	0.05868	-0.05072
17H	0.21254	0.20488	0.27122	0.00766	0.05868	-0.05072
18C	-0.1998	-0.2952	-0.2975	0.09542	-0.09774	0.19203
19C	-0.19979	-0.29521	-0.29753	0.09542	-0.09774	0.19203
20C	-0.54059	-0.56467	-0.57534	0.02408	-0.03475	0.05849
21H	0.19488	0.18244	0.27889	0.01244	0.08401	-0.07115
22H	0.22962	0.22107	0.27396	0.00855	0.04434	-0.03558
23C	-0.54059	-0.56467	-0.57534	0.02408	-0.03475	0.05849
24H	0.19488	0.18244	0.27889	0.01244	0.08401	-0.07115
25H	0.22962	0.22107	0.27396	0.00855	0.04434	-0.03558
26C	0.68611	0.68641	0.56992	-0.0003	-0.11619	0.11521
27H	0.25152	0.23853	0.29622	0.01299	0.0447	-0.03152
28H	0.24829	0.24318	0.27965	0.00511	0.03136	-0.02610
29H	0.25152	0.23853	0.29622	0.01299	0.0447	-0.03152
30H	0.24829	0.24318	0.27965	0.00511	0.03136	-0.02610
31N	-0.63416	-0.65091	-0.21263	0.01675	0.42153	-0.40241
32O	-0.63965	-0.67234	-0.4961	0.03269	0.14355	-0.11021

Table 5. The aniline quantum chemistry reactivity index
表 5. 苯胺量子化学反应性指数

原子序号	e_k	e_k^{-1}	e_k^{+1}	f_k^+	f_k^-	$\Delta\omega_k^\pm$
1C	-0.22539	-0.25779	-0.21231	0.0324	0.01308	0.00089
2C	-0.29085	-0.43214	-0.19596	0.14129	0.09489	0.00215
3C	0.15639	0.00562	0.21339	0.15077	0.057	0.00434
4C	-0.29085	-0.43208	-0.19594	0.14123	0.09491	0.00214
5C	-0.22539	-0.25779	-0.21232	0.0324	0.01307	0.00089
6C	-0.28667	-0.31712	-0.08419	0.03045	0.20248	-0.00796
7H	0.24409	0.21654	0.28948	0.02755	0.04539	-0.00083
8H	0.23681	0.20578	0.27773	0.03103	0.04092	-0.00046
9H	0.23681	0.20579	0.27774	0.03102	0.04093	-0.00046
10H	0.24409	0.21654	0.28948	0.02755	0.04539	-0.00083
11H	0.24422	0.21004	0.285	0.03418	0.04078	-0.00031
12N	-0.872	-1.0706	-0.64006	0.1986	0.23194	-0.00154
13H	0.41438	0.3536	0.45399	0.06078	0.03961	0.00098
14H	0.41437	0.35361	0.45398	0.06076	0.03961	0.00098

Table 6. The 2-fluaniline quantum chemical reactivity index
表 6. 2-氟苯胺量子化学反应性指数

原子序号	e_k	e_k^{-1}	e_k^{+1}	f_k^+	f_k^-	$\Delta\omega_k^\pm$
1C	-0.23927	-0.30085	-0.20371	0.06158	0.03556	0.00126
2C	-0.27887	-0.47852	-0.20787	0.19965	0.071	0.00623
3C	0.10114	-0.04885	0.16103	0.14999	0.05989	0.00436
4C	0.36214	0.32272	0.45859	0.03942	0.09645	-0.00276
5C	-0.2882	-0.37951	-0.28189	0.09131	0.00631	0.00412
6C	-0.27082	-0.24774	-0.08335	-0.02308	0.18747	-0.01020
7H	0.24787	0.22018	0.2928	0.02769	0.04493	-0.00083
8H	0.24162	0.22043	0.28368	0.02119	0.04206	-0.00101
9H	0.25938	0.23513	0.30471	0.02425	0.04533	-0.00102
10H	0.24833	0.21187	0.28977	0.03646	0.04144	-0.00024
11N	-0.86948	-1.08616	-0.63305	0.21668	0.23643	-0.00096
12H	0.43012	0.3781	0.46589	0.05202	0.03577	0.00079
13H	0.41787	0.33267	0.45835	0.0852	0.04048	0.00217
14F	-0.36181	-0.37842	-0.30496	0.01661	0.05685	-0.00195

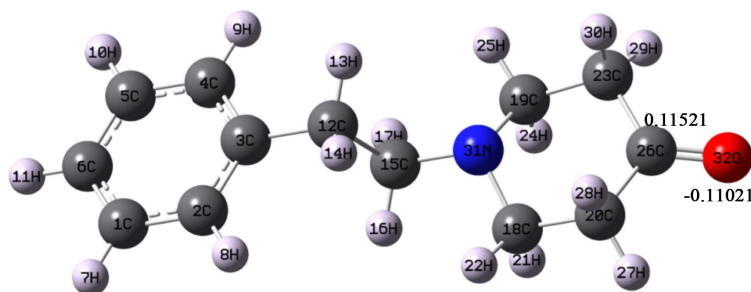


Figure 6. 1-phenylethylpiperidone molecular model and net affinity index

图 6. 1-苯乙基哌啶酮分子模型及其净亲电指数 $\Delta\omega_k^\ddagger$

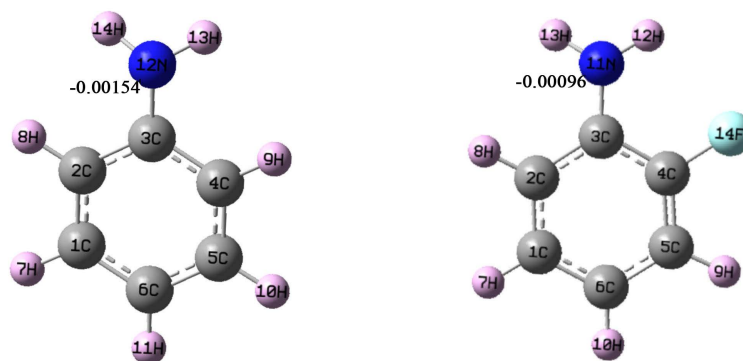


Figure 7. Aniline and 2-fluoroaniline molecular model and net affinity index $\Delta\omega_k^\ddagger$

图 7. 苯胺和 2-氟苯胺分子模型及其净亲电指数 $\Delta\omega_k^\ddagger$

上述苯胺的 12N 原子的 $\Delta\omega_{12N}^\ddagger = -0.00154$ ，而 2-氟苯胺的 11N 原子的 $\Delta\omega_{11N}^\ddagger = -0.00096$ ，均为负值，说明他们都是亲核性能，但他们的亲核性都很小。实际实验中，由于苯胺或 2-氟苯胺的亲核性很小，所以在 1-苯乙基哌啶酮与苯胺或 2-氟苯胺的反应中，需要加入酸性催化剂，如冰醋酸或对甲苯磺酸，以提供亲电性的质子。即 1-苯乙基哌啶酮羰基首先接受一个质子，活化羰基基团，使得羰基的 C 原子更易被亲核试剂攻击。但苯胺 N 原子 $|\Delta\omega_{12N}^\ddagger| > 2\text{-氟苯胺 N 原子 } |\Delta\omega_{11N}^\ddagger|$ ，显然亲核性相对更强。即 2-氟苯胺与 1-苯乙基哌啶酮起反应比苯胺要困难的多。同时，实验结果表明，2-氟苯胺与 1-苯乙基哌啶酮反应所需的时间要多 8 个小时，且反应产率较低。

5. 小结

本文采用量子化学计算方法获得净亲电指数和 Wiberg 键级等有关参数，阐明了苯乙基哌啶酮化学合成及其相关反应所涉及的化学反应的机理和活性问题[1] [2] [3] [4] [5]，包括一些典型的反应机理，如 Michael 加成反应、Dieckmann 缩合反应，及苯乙基哌啶酮与苯胺、2-氟苯胺反应生成席夫碱的反应活性等。

研究结果表明，量子化学方法是研究化学反应区域选择性、反应活性问题和探讨化学反应机理的强有力工具。对于研究化学反应机理、化学反应的可行性、化学反应的选择性及难易程度等具有重要的理论意义。

参考文献

- [1] Parr, R.G. and Yang, W. (1989) Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press, Oxford,

UK.

- [2] Yang, B.W., Fu, M.L., Zhao, Z.G., Qu, Y.L., Shao, K.Y. and Hu, W.X. (2018) Study on Nitrotriazole Related Chemical Reaction Possibility and Its Reaction Mechanism with Quantum Chemical Reactivity Index. *Chemical Research in Chinese University*, in Press.
- [3] Shen, X.Z., He, H.J., Yang, B.W., Zhao, Z.G., Shao, K.Y. and Hu, W.X. (2017) Studies on the Activities of Electrophilic Sites on Benzene ring of 4-Substituted Anilines and Their Acyl Compounds with Multiphlicity Descriptor. *Chemical Research in Chinese University*, **33**, 773-778. <https://doi.org/10.1007/s40242-017-7112-z>
- [4] 邵开元, 王乔, 刘明, 邢欣, 胡文祥. 应用量子化学反应性指数评估化合物的亲核能力[J]. 化学通报, 2014, 77(3): 227-235.
- [5] 邵开元, 何华军, 王刚, 刘亚军, 沈喜洲, 胡文祥. 化学势变化率对催眠药类化合物 QSAR 影响[J]. 化学通报, 2017, 80(11): 1061-1066.

Hans 汉斯

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2574-4127, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: cc@hanspub.org