

研究论文

3-甲基环状乙撑磷酸二酯醇解的反应途径研究

夏福婷^a 朱华^{*,a,b} 薛英^{a,b} 郭勇^a 谢代前^c

(^a四川大学化学学院 成都 610064)

(^b四川大学生物治疗国家重点实验室 成都 610064)

(^c南京大学化学化工学院 理论与计算化学研究所 南京 210093)

收稿日期 2008-8-5 修回日期 2008-11-2 网络版发布日期 2009-7-22 接受日期 2009-1-8

摘要

采用密度泛函理论和MP2方法研究了3-甲基环状乙撑磷酸二酯(MEP)与甲醇的反应途径: (I) CH₃O—+MEP; (II) CH₃OH+MEP; (III) CH₃O—+HMEP (MEP的质子化形式); (IV) CH₃OH+HMEP. 在B3LYP/6-31++G(d,p)水平上优化了四条反应途径的反应物、中间体、过渡态及产物的几何构型, 并在同水平上进行了自然电荷分析, 然后在MP2/6-311++G(3df,2p)水平上计算了各驻点的单点能. 采用极化连续介质模型(PCM)研究了各途径在苯、甲醇和水溶液中的溶剂化效应. 计算结果表明, 溶剂效应使途径(I)的自由能垒降低, 而使途径(II)和(IV)的决速步骤的自由能垒升高. 在气相和苯溶剂中途径(IV)是反应的优势途径, 在甲醇和水溶剂中途径(I)则成为最优. 研究结果进一步表明实验条件下途径(II)与(IV)对总醇解反应的贡献相当.

关键词

[3-甲基环状乙撑磷酸二酯](#) [甲醇解反应](#) [反应途径](#) [溶剂效应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

朱华 zhuhua@scu.edu.cn

作者个人主页:

夏福婷^a 朱华^{*,a,b} 薛英^{a,b} 郭勇^a 谢代前^c

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (507KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[3-甲基环状乙撑磷酸二酯” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [夏福婷,朱华,薛英,郭勇,谢代前](#)