

氟氯甲醇及其异构体的气相离解反应研究

王少坤,候华,张庆竹,孔春燕,王宝山,顾月姝

山东大学化学与环境科学学院;德州师范专科学校化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在G3(MP2)水平上,通过对CH₂ClFO的势能面(PES)上关键驻点的能量计算,共找到3种中间体,14个过渡态,20种产物通道,并对氟氯甲醇(CHClFOH)及其异构体(CH₂FOCl和CH₂ClOF)的气相解离机理进行了讨论。结果表明:四中心的1,2-HX(X=Cl,F)消去反应是氟氯甲醇的主要通道,但对于其同分异构体,OCl和OF键断裂又是强竞争过程。

关键词 [氟氯甲醇](#) [异构体](#) [离解](#) [反应机理](#)

分类号 [0621](#)

The theoretical study of the gas phase decomposition of fluorochloromethanol and its isomers

Wang Shaokun,Hou Hua,Zhang Qingzhu,Kong Chunyan,Wang Baoshan,Gu Yueshu

Abstract A series of key stationary points of potential energy surface (PES) for the CH₂ClFO system has been calculated at G3(MP2) level. The calculations reveal three intermediaries, fourteen transition states and twenty product channels. With the stationary points, gas phase decomposition mechanism of CHClFOH is discussed. The four-center 1,2-HX(X=F, Cl) elimination mechanism is dominant reaction channel for CHClFOH. But OCl and OF bond scissions might be competitive in the case of its two isomers.

Key words [ISOMER](#) [DISSOCIATION](#) [REACTION MECHANISM](#)

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“氟氯甲醇”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [王少坤](#)
- [候华](#)
- [张庆竹](#)
- [孔春燕](#)
- [王宝山](#)
- [顾月姝](#)