

## 二硅烯化合物顺反异构化过渡态动力学参数的计算

居冠之, 杨玉伟

山东大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文介绍了过渡态理论对双键取代物顺反异构化过程的处理方法. 计算了1,2-二叔丁基-1,2-二(2,4,6-三甲苯基)二硅烯、1,2-二[二(三甲硅基)-氨基]-1,2-二(2,4,6-三甲苯基)二硅烯和1,2-二甲基-1,2-二苯基二硅烯等化合物的顺反异构化的活化熵变和相应过程的Arrhenius A因子.

前两个化合物的计算结果与West的实验值符合得很好. 后一个化合物, 尚未见到动力学实验结果的报道. 本文指出了这类化合物构型熵贡献的重要性.

**关键词** [动力学](#) [计算](#) [量子化学](#) [参数](#) [熵](#) [异构化反应](#) [过渡态理论](#) [反应速度](#) [构型](#) [硅烯](#)

分类号 [0621.16](#)

## Transition state kinetic parameters calculation on cis-trans isomerization in disilene

JU GUANZHI, YANG YUWEI

**Abstract** The transition state theory approach to cis-trans isomerization in substituted disilenes is presented. The activation entropy of the isomerization and corresponding Arrhenius A-factor for these substituted disilenes such as 1,2-di-tert-butyl-1,2-dimesityldisilene, 1,2-bis[bis(trimethylsilyl)amino]-1,2-dimesityldisilene and 1,2-dimethyl-1,2-diphenyldisilene have been calculated. The results of the first two compounds are in good agreement with those found experimentally (M. J. Michalczyk et al., 1985). No experimental result was available for the third one. The structure-entropy for such kinds of compounds is important.

**Key words** [DYNAMICS](#) [CALCULATION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [PARAMETER](#) [ENTROPY](#) [ISOMERIZATION REACTION](#) [TRANSITION STATE THEORY](#) [REACTION RATE](#) [CONFIGURATION](#) [SILYLENE](#)

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“动力学”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [居冠之](#)
- [杨玉伟](#)