

不饱和类卡宾H₂C=CLiF的结构及氢迁移反应的DFT研究

刘奉岭

山东师范大学化学系, 济南(250014)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用量子化学中的密度泛函DFT方法, 在B3LYP/6-311G~*水平上研究了不饱和类卡宾H₂C=CLiF的结构。结果表明, 只有1种平衡结构是稳定的。对稳定的平衡结构, 找到了分子内氢迁移反应的过渡态, 并计算了不同温度下不饱和类卡宾 H₂C=CLiF的平均寿命 τ , 在200 K时, $\tau = 7.9$ d, 在300 K仅为 $\tau = 2.4$ s。

关键词 [碳烯](#) [氢转移](#) [过渡态](#) [寿命](#)

分类号 [0641](#)

DFT Studies on the Structures and Intramolecular H-Transfer Reaction of Unsaturated Carbenoid H₂C=CLiF

Liu Fengling

Department of Chemistry, Shandong Normal University, Jinan(250014)

Abstract Structures and properties of unsaturated carbenoid H₂C=CLiF have been determined by using DFT at B3LYP/6-311G~* level. H₂C=CLiF has two equilibrium structures, but only one can exist, the structure is as following: The transition-state of intra-molecular H-transfer reaction of the above structure has been determined, and the average lifes of H₂C=CLiF at different temperatures have been obtained to be $\tau = 7.9$ days at 200 K and $\tau = 2.4$ s at 300 K.

Key words [CARBENE](#) [HYDROGEN TRANSFER](#) [TRANSITION STATE](#) [LIFE](#)

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“碳烯”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘奉岭](#)