

## 气态丙烯酸光致脱羧反应AM1法研究

方维海; 方德彩; 刘若庄

北京师范大学化学系, 北京 100875

摘要:

半经验的自洽场分子轨道法(AM1)被用来研究激发单态( $\sim 1\pi\pi^*$ )和三态( $\sim 3\pi\pi^*$ )丙烯酸的脱羧反应. 计算结果支持Robert等人提出的光解机理. 与实验结合. 进一步推测, 丙烯酸光致脱羧反应的第一步, 是沿单态途径进行, 第二步沿三态途径进行. 单态和三态反应途径中的反应物、过渡态、中间体和产物都用能量梯度技术进行了优化. 对于过渡态和中间体, 还作了振动分析, 确证它们分别是一级鞍点和能量极小值点.

关键词: 丙烯酸 光致脱羧反应 半经验自洽场分子轨道法

收稿日期 1992-05-12 修回日期 1992-10-12 网络版发布日期 1993-12-15

通讯作者: 刘若庄 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 王飞宇;高保娇;王蕊欣.在共聚物(P(GMA-co-MMA)侧链实现卟啉化合物的同步合成与键合[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 341-346
2. 张晟卯;张治军;党鸿辛;刘维民;薛群基.TiO<sub>2</sub>/聚丙烯酸丁酯纳米复合薄膜的制备及结构表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 171-173
3. 陶跃武;钟顺和.激光促进铋磷酸盐表面异丁烷选择氧化反应 [J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 356-360
4. 尹艺青;房喻;胡道道;高改玲.N-乙烯基吡啶标记甲基丙烯酸-苧烯共聚物的荧光特性 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 776-780
5. 张颖;房喻;林书玉;刘静;杨娟玲.纳米结构型PMAA/CdS复合微球的微凝胶模板法制备研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 897-901
6. 谢志明;高翩;李卓美.丙烯酸酯共聚物无皂水溶胶稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 438-443
7. 黄为钧;陈素明;谈夫;杨祯祥.苯丙烯酸衍生物的热力学特性研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(02): 151-153
8. 罗云霞;杨弘;虞斌;丁孟贤;姜炳政.分子活动性对iso-PMMA辐射裂解和消旋的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 604-609
9. 方维海;方德彩;刘若庄.丙烯酸气相热解机理的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 630-634
10. 蒋葵阳;张隽;桂琳琳.PMMA-ZrO<sub>2</sub>等有机无机杂化材料的制备与表征[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 407-412
11. 唐定国;刘建红;慈云祥;其鲁.一种新型凝胶态聚合物电解质的制备和性能[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1263-1268
12. 刘万强;王学业;李新芳;龙清平;文小红;李建军.聚丙烯酸酯类Tg的量子化学-神经网络研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 596-601
13. 官建国;赵素玲;谢洪泉.电场和温度对含水电流变液性能的影响[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 242-246
14. 甘治平;官建国.化学自组合法制备钡铁氧体亚微空心球[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 189-192
15. 董相廷;何颖;闫景辉;薛勃飞;冯秀丽;洪广言.纳米AgBr/PMMA光致变色杂化材料制备与表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1159-1162
16. 陈志萍;高保娇;杨晓峰.胺基化PGMA交联微球对胆红素的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1417-1424
17. 张邦华;李春刚;宋谋道;周庆业;郝广杰;张莹.PVC/PBD-b-PMMA共混体系相容性的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 807-811
18. 张隽;罗胜成;桂琳琳;唐有祺.PMMA-TiO<sub>2</sub>有机无机杂化玻璃的制备与表征[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 289-292
19. 姚加;汪青;童达君;李浩然.不同嵌段比的PEG-b-PDMAEMA共聚物在水溶液中的自聚集行为[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1612-1616
20. 汪剑;高保娇;郭浩鹏.接枝微粒PMAA/SiO<sub>2</sub>在水介质中对杀虫剂抗蚜威的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1905-1911
21. 张兰;张世超.聚(丙烯酸腈-甲氧基聚乙二醇单丙烯酸酯-丙烯酸锂)的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1943-1947
22. 王芳平;杜新贞;王春;董小丽;陈慧.聚丙烯酸接枝辛基酚聚氧乙烯醚的合成、表征和胶束化[J]. 物理化学学报,

扩展功能

本文信息

PDF(848KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 丙烯酸

▶ 光致脱羧反应

▶ 半经验自洽场分子轨道法

本文作者相关文章

▶ 方维海

▶ 方德彩

▶ 刘若庄

23. 彭顺金;赵雷;武利民.含氟丙烯酸酯聚合物乳胶膜表面性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 531-536
  24. 王占良;唐致远;耿新;薛建军.新型PMMA基聚合物电解质的研制 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 272-275
  25. 刘守信;房喻;胡道道;吕宏旺.聚甲基丙烯酸与修饰聚丙烯酰胺间的络合物[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 214-220
  26. 汤勇铮;唐业仓;罗世忠;傅中;张文敏.微波制备均分散无皂高分子纳米微球[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 620-623
  27. 翟慕衡;张文敏;盛恩宏;傅中;张峰.微波合成均分散高分子微球及其机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 747-751
  28. 张文敏;吴奇;魏涛;刘展华.高浓度窄分布无皂高分子纳米粒子胶乳的制备[J]. 物理化学学报, 2000,16(02): 116-120
  29. 戴乐蓉;苏晓燕;陈慧英;吴佩强.聚[甲基丙烯酸(磺酸钠烷基酯)]高分子溶致液晶[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1060-1063
  30. 宋默;梁好均;陈宜宜;姜炳政.聚甲基丙烯酸甲酯与苯乙烯-丙烯腈共聚物混合体系相分离初期的固体NMR研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 513-517
-