

丙烯酸气相热解机理的理论探讨

方维海; 方德彩; 刘若庄

北京师范大学化学系, 北京 100875

摘要:

用自洽场分子轨道法(半经验AM1法及从头算HF/3-21G法)研究了基态丙烯酸脱羧的反应途径. 计算结果表明, 除前人从理论上已经得到的一步反应途径外, 尚有一个与之竞争的二步反应途径, 且两步反应的总速率大于一步反应的. 计算所得的反应速率常数很小, 与实验结果(丙烯酸在827 K仅有25%左右发生脱羧, 脱水等反应)是一致的. 研究表明, 有较稳定的中间体存在, 有可能在实验中被检测到, 但有待于进一步验证.

关键词: 丙烯酸 热解机理 自洽场分子轨道法

收稿日期 1992-04-21 修回日期 1992-07-24 网络版发布日期 1993-10-15

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.TiO₂/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. 方维海;方德彩;刘若庄.气态丙烯酸光致脱羧反应AM1法研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 788-790
9. 罗云霞;杨弘;虞斌;丁孟贤;姜炳政.分子活性对iso-PMMA辐射裂解和消旋的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 604-609
10. 蒋葵阳;张隽;桂琳琳.PMMA-ZrO₂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T_g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-TiO₂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/SiO₂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(4448KB)

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

▶ 热解机理

▶ 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
-