

研究论文

DFT法研究3-羟基丙烯醛的双键旋转异构反应机理

蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙予罕

西安交通大学应用化学系;化学工程系, 西安 710049;中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室, 太原 030001

摘要:

利用密度泛函理论(DFT)分别在B3LYP/6-31G**和B3LYP/6-311++G**的计算水平上优化了基态3-羟基丙烯醛分子在双键旋转异构反应过程中的平衡态以及过渡态的几何构型,分析了反应过程中键参数的变化,计算了该反应的内禀反应坐标(IRC),发现在重排反应途径上存在一个四元环骨架的中间体.通过振动分析对平衡态和过渡态进行了确认,并得到了零点能.计算结果表明,基态3-羟基丙烯醛分子的双键旋转异构反应经过两步完成,第一步反应位垒稍高,第二步反应位垒较低,存在着发生重排反应的可能性.

关键词: 3-羟基丙烯醛 异构反应 过渡态 密度泛函理论

收稿日期 2001-12-07 修回日期 2002-01-23 网络版发布日期 2002-06-15

通讯作者: 王海霞 Email: hxwang@mail.xjtu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1240KB)

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

▶ 3-羟基丙烯醛
▶ 异构反应
▶ 过渡态
▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 蒲敏
▶ 王海霞
▶ 冯霄
▶ 吴东
▶ 孙予罕