

研究论文

二氯甲基硅烷醇解的量化计算

李凤仪; 徐文媛; 余军文

南昌大学应用化学研究所, 南昌 330047; 华南理工大学化工学院, 广州 510640

摘要:

采用溶剂法和B3LYP/6-31G(d)基组研究了甲基含氢二氯硅烷的醇解反应. 结果表明, 反应分二步进行, 其一步和二步醇解均为放热反应, 并得出了反应的最佳温度、醇与硅烷的最佳配比、最佳进样方式、主反应和副反应的活化能及其可能的反应途径曲线. 计算结果和实验结果较为一致.

关键词: 二氯甲基硅烷 醇解 B3LYP/6-31G(d) 密度泛函理论

收稿日期 2002-08-30 修回日期 2002-11-05 网络版发布日期 2003-04-15

通讯作者: 李凤仪 Email: fy-Li@sohu.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1447KB\)](#)

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

▶ [二氯甲基硅烷](#)

▶ [醇解](#)

▶ [B3LYP/6-31G\(d\)](#)

▶ [密度泛函理论](#)

本文作者相关文章

▶ [李凤仪](#)

▶ [徐文媛](#)

▶ [余军文](#)