

固态二乙炔拓扑聚合反应动力学的量子化学研究

颜顺启,张启元,严继民

中国科学院化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用协同反应模型和EHCO-ASED量子化学方法,对固态二乙炔的拓扑聚合反应:MDA(Molecular diacetylenes)→PBT(Polybutatrienes)→PDA(Polydiacetylenes)的势能曲线进行了计算,并对其轨道对称性以及能隙随反应坐标的变化进行了分析;很好地解决了文献中用Woodward-Hoffmann轨道对称守恒原理对此反应进行分析时所遇到的问题,指出了此反应是热允许的原因。

关键词 [反应机理](#) [反应动力学](#) [聚合](#) [势能](#) [乙炔](#) [P](#) [拓扑](#) [分子轨道对称守恒](#)

分类号 [0641](#)

Quantum-chemical investigation on the reaction kinetics of topochemical polymerization of solid-state diacetylenes

YAN SHUNQI,ZHANG QIYUAN,YAN JIMIN

Abstract The potential curve of the 1,4-polymn. of diacetylene to prepare polybutatrienes and further polydiacetylenes was studied based on the topochem. model and the quantum-chem. method of EHCO-ASED. The transformation of the frontier orbital symmetry along the reaction coordinates was analyzed. The problem about the Woodward-Hoffmann's orbital symmetry conservation of such reactions in the literatures was solved., and then the reasons why these reactions might be thermally allowed were presented.

Key words [REACTION MECHANISM](#) [REACTION KINETICS](#) [POLYMERIZATION](#) [POTENTIAL ENERGY](#) [ACETYLENE](#) [P](#) [TOPOLOGY](#) [CONSERVATION OF SYMMETRY OF MOLECULAR ORBITAL](#)

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“反应机理”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [颜顺启](#)

· [张启元](#)

· [严继民](#)