

自由基-分子加成反应活性的量子化学研究

王贵昌,潘荫明,赵学庄

南开大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 利用MNDO半经验量化方法对一系列氟取代烯烃进行了计算,并用广义微扰理论对计算结果进行了处理,发现该类烯烃与自由基加成反应的活化能与相应反应的二级微扰能之间存在着良好的线性关系,同时对影响反应活性的一些因素作了初步的探讨。

**关键词** [烯烃](#) [氟代烃](#) [加成反应](#) [活化能](#) [自由基](#) [微扰能](#)

分类号 [0641](#)

## Study on the reactivity of radical-molecular addition reaction using quantum method

WANG GUICHANG,PAN YINMING,ZHAO XUEZHUANG

**Abstract** In this paper, the reactivity of radical-molecular addition reaction was studied in terms of MNDO semi-empirical method and the generalized perturbation theory. It is found that a good relationship exists between the second perturbation energy and the activation energy. In addition, the factors affecting the reaction reactivity were also discussed.

**Key words** [ALKENE](#) [FLUOROHYDROCARBON](#) [ADDITION REACTION](#) [ACTIVATION ENERGY](#) [FREE RADICALS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(316KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“烯烃”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王贵昌](#)

· [潘荫明](#)

· [赵学庄](#)