

联苯基二硫代磷酸旋光异构体之间相互转化的量子化学研究

郭洪猷,薛石雷,曹维良,王作新,李增民,沈其丰

北京化工学院应用化学系;北京农业大学应用化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 二硫代磷酸酯类化合物在农药中占十分重要的地位。本文合成的O,O-2,2'-联苯基二硫代磷酸的烷基酯即其中之一。其结构已经IR, NMR谱分析和元素分析。本文采用ASED-MD法从理论上研究了母体分子的两种旋光异构体的立体构型及其相互转化的过程,并确定了转化过程的活化能。

关键词 [量子化学](#) [二联苯 P](#) [结构与性能关系](#) [农药](#) [活化能](#) [立体结构](#) [构型](#) [二硫代磷酸 P](#) [光学异构](#) [休克尔分子轨道](#)

分类号 [0641](#) [TQ45](#)

Quantum chemical study on the transformation between two enantiomers of 2-thiono-2-mercapto-4,5,6,7-bisbenzo-1,3-dioxo-2-phospha-cycloheptane

GUO HONGYOU, XUE SHILEI, CAO WEILIANG, WANG ZUOXIN, LI ZENGMIN, SHEN QIFENG

Abstract The transformation between two enantiomers of the title compound I was studied with the atom superposition-electron delocalization MO method. The potential energy surface of the transformation, stable configurations of the enantiomers and the activation energy have been obtained. These results are in agreement with the experiments

Key words [QUANTUM CHEMISTRY](#) [BIPHENYL P](#) [STRUCTURE AND PROPERTY CORRELATION](#) [PESTICIDES](#) [ACTIVATION ENERGY](#) [SPATIAL STRUCTURE](#) [CONFIGURATION](#) [PHOSPHORODITHIOIC ACID P](#) [OPTICAL ISOMERISM](#) [HUCKEL 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“量子化学”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [郭洪猷](#)
- [薛石雷](#)
- [曹维良](#)
- [王作新](#)
- [李增民](#)
- [沈其丰](#)