

SCRCR*CO重排反应的量子化学研究

李永红,洪三国

江西师范大学化学系, 南昌 330027

摘要:

用MINDO/3方法研究SCRCR*CO的热重排反应的机理, 给出了活化能和IRC途径, 讨论了活化能与取代基R'和迁移基R的性质之间的内在联系。

关键词: 重排反应 过渡态 反应途径

收稿日期 1995-04-08 修回日期 1995-07-18 网络版发布日期 1996-02-15

通讯作者: 洪三国 Email:

本刊中的类似文章

1. 李来才;周红平;田安民.NH₂自由基与O₃反应机理的从头计算[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 838-840
2. 冀永强;冯文林;郝茂荣;李会英.CH₃NO₂和CH₃自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 721-726
3. 王遵尧;肖鹤鸣;李金山.F+Cl₂->ClF+Cl和Cl*F+Cl->Cl'+ClF的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
4. 徐文媛;洪三国;彭以元;李永红;王生升.苯基及取代苯基四唑异构反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1115-1118
5. 廖结棣;李厚文.势能面拓扑结构失稳与A+B₂反应途径分叉条件[J]. 物理化学学报, 1995,11(03): 247-251
6. 李济生;刘奉岭;宁世光.环丁烷热力学性质及其存在寿命的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 921-924
7. 李庆明;方德彩;傅孝愿.烷基氟化物热消除反应的理论研究-1[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 434-437
8. 杨捷;梁国明;田安民;鄢国森.H₃PO₃→H₂POH异构化反应的LMO研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 367-370
9. 冀永强;傅孝愿.2-硝基丙烷热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 22-25
10. 袁丽霞;杨郭英;孙德升;王遵尧;池清清.Br₂+Cl₂=2BrCl反应机理的理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1191-1195
11. 韦文美;郑仁慧;田燕;何天敬;陈东明;刘凡镇.过氧硝酸乙酯分解反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 53-58
12. 郑妍;查东;李来才.CF₃O₂自由基和NO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 156-160
13. 李永红;彭以元;王牲;洪三国.AM1法研究取代乙烯与环己-1,3-二烯热加成[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 532-536
14. 李会英;蒲敏;陈标华.DFT法研究分子筛催化trans-2-丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 898-902
15. 张东东;周立新.含平面胺配体的反式二价钡配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2551-2557
16. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.CIO自由基反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 166-172
17. 张彩云;崔丽亚;武海顺.内含式复合物X@(HAINH)₁₂ (X=Be,Mg,Ca,Zn,Al+,Ga+)的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 405-410
18. 许保恩;李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;张萍;刘吉荣.CH₃SH与CN-自由基的反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1245-1251
19. 张旭 储伟 陈建钧 戴晓雁.甲醇钠引发的环氧乙烷开环聚合反应过程[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 451-456
20. 洪三国.苯并二氮吡喃热分解反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 297-301
21. 李银玲;洪三国;王牲.碳酸及碳酸酯热消除反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 414-418
22. 王连英;吴文鹏;张敬来;曹泽星.反式和顺式HOOH的电子光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1079-1084
23. 武海顺;许小红;马文理;贾建峰.AMT异构体互变机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 408-413
24. 李来才;田安民.CH₃(²A')自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 626-629
25. 蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华.DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
26. 李银玲;王凤奇;魏珍;张建成;刘新厚.水杨又缩苯胺及其衍生物的变化机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 981-987
27. 李来才;朱元强;查东;田安民.CH₃CF₂O₂与HO₂自由基反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 490-493
28. 王勇;李浩然;王从敏;许映杰;韩世钧.单重态二溴卡宾和甲醛加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1339-1344
29. 倪哲明 毛江洪 潘国祥 胥倩 李小年.Pd催化甲醇裂解制氢的反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 876-882
30. 郑铮, 刘振明, 张尧仁.一种确定反应中间态几何特征和能量的综合性方法[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1439-1442
31. 李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.HCHO+X(X=F、Cl、Br)的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2053-2058
32. 毛江洪;倪哲明;潘国祥;胥倩.Cu催化水煤气的变换反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2059-2064
33. 周俊红;曾艳丽;张雪英;孟令鹏;郑世钧.IClO₂异构化反应机理及电子密度拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1229-1234
34. 胡启山;刘俊玲;李来才;田安民.钴原子催化活化乙烷的反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 916-920
35. 徐伯华;李来才;王欣;田安民.N₂H₄异构体的结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 67-73
36. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙予罕.DFT法研究3-羟基丙醛的双键旋转异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 522-526
37. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤.HBO₂异构体的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 87-90
38. 李来才;周红平;田安民.F原子与臭氧反应机理的量子化学研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 59-61
39. 徐文媛;刘够生;彭以元;洪三国.AM1研究甲酰胺和苯甲酰叠氮的热分解反应[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 669-672
40. 洪三国;彭以元;朱时来;王牲.邻乙酰基环醇热分解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 186-189
41. 傅爱萍;杜冬梅;周正宇;俞庆森.金属原子(离子)-苯配合物的电子转移反应[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 317-324
42. 李永红;洪三国;冯文林;雷鸣.3-羟基-2-吡啶胺异构反应的机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 992-996
43. 邹鹏;吴国盛;陈文武;杨达林;盛六四;武国华;叶为全;张允武.1,4-二氧六环的光电离解离[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 21-26
44. 默丽欣;曾艳丽;郑世钧;孟令鹏.BH₂⁺与H₂O反应机理的量子拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 706-711
45. 李会英;冯文林;冀永强;徐振峰;雷鸣.CH₂O+O[²P]→CHO+OH反应途径和变分速率常数 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 446-450
46. 卢秀慧;刘成卜;邓从豪.二氟硅烷与甲醛环加成反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 78-81
47. 杨丽娟;孟令鹏;曾艳丽;郑世钧.CH₂NH与O(³P)反应的量子化学及电子密度拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 311-316
48. 洪三国.取代基对α-氨基乙腈热解反应影响的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 305-310
49. 刘若庄;马思谕;李宗和.CH与H₂分子反应动力学及逸态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
50. 李瑞芳;尚贞峰;许秀芳;王贵昌.扶手椅型单壁碳纳米管生长机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1388-1392
51. 李庆明;傅孝愿;张敬朝;曹维良.HCN→HNC异构化反应过渡态附近的拓扑特性[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 724-727
52. 韩云竹;朱德中;赵成大.羟氨(H₂NOH)重排反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 231-233
53. 刘乐燕;耿志远;赵存元;王永成;李朝晖.气相中烯丙基负离子与N₂O反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 217-222
54. 张福兰;李来才;田安民.乙烷在Ni(111)表面的吸附和解离[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
55. 赵亚华.含有一个非平面杂环胺配体的新型反铂抗癌药物的水解机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2350-2356
56. 孙希媛;杜际广, 蒋刚.PdO^{0,+1}, PdH^{0,+1}及PdOH的从头计算[J]. 物理化学学报, 0,0: 0-0
57. 王永霞, 段雪梅, 王钦, 刘靖尧.甲磺酸和氢原子反应的从头算直接动力学[J]. 物理化学学报, 0,0: 0-0