

引用信息: Xue Shilei; Guo Hungyou; Cao Weiliang; Wang Zuoxin. Acta Phys. -Chim. Sin., 1989, 5(06): 670-676 [薛石雷; 郭洪猷; 曹维良; 王作新. 物理化学学报, 1989, 5(06): 670-676]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

羰基钴催化烯烃醛化反应中氢活化作用的理论研究—— I .氢在 $\text{RCOCo}(\text{CO})_3$ 上的氧化加成反应

薛石雷; 郭洪猷; 曹维良; 王作新

北京化工学院应用化学系

摘要:

本文运用ASED-MO理论计算了羰基钴催化烯烃醛化反应中氢的氧化加成反应($\text{CH}_3\text{COCo}(\text{CO})_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{COCo}(\text{H})_2(\text{CO})_3$)的反应物, 产物构型和反应过程的能量变化。得到了反应物、产物的稳定构型。由计算结果, 提出了两种可能的反应途径, 并分别获得了两种途径的位能面图。由此求出反应的活化能和反应热并根据计算结果对反应过程进行了讨论。

关键词:

收稿日期 1988-06-08 修回日期 1988-11-30 网络版发布日期 1989-12-15

通讯作者: 王作新 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(2268KB\)](#)

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](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [薛石雷](#)

▶ [郭洪猷](#)

▶ [曹维良](#)

▶ [王作新](#)