



单取代芳烃的硝化

<http://www.firstlight.cn> 2010-05-17

以甲苯、乙苯、异丙苯、叔丁基苯、氟苯等为硝化底物，通过混酸硝化得到这些单取代芳烃转化率最大时的混酸硝化强度 ϕ 。运用密度泛函理论，在B3LYP/6-311G**水平上优化了9种单元芳烃的几何构型，计算苯环上C原子电荷分布。讨论了9种取代基的定位效应，以苯环取代基以外环上C原子总净电荷QRΣC(2~6)表示单取代苯的硝化反应活性与硝化强度 ϕ 之间的关系。实验结果表明，烷基苯、卤苯、硝基苯的硝化反应活性与其混酸硝化转化率达最大时的混酸硝化强度 ϕ 呈良好的线性关系。

[存档文本](#)