

酰氧基甲酸酯热分解反应的量子化学研究

王生,洪三国

江西师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用AM1方法研究了酰氧基甲酸酯热分解反应的机理,结果表明这类化合物可消除二氧化碳得到酯,也可消除烯酮得到烷氧基甲酸,后者比前者易于进行

关键词 [酯](#) [反应机理](#) [二氧化碳](#) [量子化学](#) [烯酮](#) [热分解反应](#) [江西省自然科学基金](#) [酰氧基甲酸酯](#) [烷氧基甲酸](#)

分类号 [0641](#)

Quantum chemical study of the thermolysis of acyloxy formyloxy ethers

WANG SHEN,HONG SANGUO

Abstract AM1 method was used to study the thermolysis of $\text{RCO}_2\text{CO}_2\text{R}_1$ ($\text{R} = \text{Me}, \text{Ph}, 2\text{-}, 3\text{-}, 4\text{-cyanophenyl}, 4\text{-O}_2\text{NC}_6\text{H}_4$; $\text{R}_1 = \text{Me}, \text{Et}, \text{CH}_2\text{NO}_2$). The results obtained by the calens. show that alkyl acyloxyformates were thermally decomposed into the ethers and carbon dioxide. Reaction mechanism was discussed.

Key words [ESTERS](#) [REACTION MECHANISM](#) [CARBON DIOXIDE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [KETENE](#) [REACTION KINETICS FOR THE DECOMPOSITION](#)

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“酯”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王生](#)
- [洪三国](#)