

羟基负离子与一氟甲烷双分子亲核取代反应的量子化学研究

王曙光,潘道皓,袁身刚

华东师范大学化学系;中国科学院上海有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用LCAO-MO-SCF ab initio方法,对 $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{F}^-$ 反应进行了过渡态理论及前线轨道理论的量子化学研究,以4-31G为基组,计算了反应进程的势能曲线,得到了过渡态的几何构型,并用MP2方法进行了电子库仑相关效应的校正,反应活化能的计算值与实验数据较为一致。用前线轨道理论对反应中分子重新组合过程进行了轨道分析,较全面地解释了该反应的机理。

关键词 [反应机理](#) [取代反应](#) [量子化学](#) [羟基](#) [从头计算法](#) [亲核反应](#) [过渡态理论](#) [双分子反应](#) [氟代甲烷](#) [前沿轨道理论](#)

分类号 [0641](#)

Quantum chemical studies of the SN2 reaction between hydroxyl anion and fluoromethane

WANG SHUGUANG,PAN DAOAI,YUAN SHENGANG

Abstract The title SN2 reaction has been studied by means of ab initio LCAO-MO-SCF methods at HF/4-31G level and MP2/4-31G level. The complete geometry optimization of reactants, products, and transition state have been performed. The double-well potential energy curve was obtained in accordance with ion-mol. reactions. At the MP2 level ΔH^\ddagger and E_a of this reaction were obtained. Vibrational frequencies of transition state was calculated and the harmonic vibrational mode of virtual vibration was obtained.

Key words [REACTION MECHANISM](#) [SUBSTITUTION REACTION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [HYDROXY GROUP](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [NUCLEOPHILIC REACTION](#) [TRANSITION STATE THEORY](#) [BIMOLECULAR REACTION](#) [FLUOMETHANE](#) [FRONTIER ORBITAL THEORY](#)

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“反应机理”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王曙光](#)

· [潘道皓](#)

· [袁身刚](#)