

RCH=CH₂与过氧甲酸反应的量子化学研究

洪三国,傅孝愿

江西师范大学化学系;北京师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用MINDO/3方法研究了烯炔RCH=CH₂(R=H, CH₃, CHO和NO₂)与过氧甲酸反应的机理。研究表明, RCH=CH₂与过氧甲酸反应是亲电反应, 在加热条件下较容易进行。乙烯与过氧甲酸反应的过渡态具有局部对称结构; 若R为取代基时, 这种对称性不复存在, 对于R为给电子基, 过氧基的氧偏向与取代基相连的乙烯碳原子, R为吸电子基, 过氧基氧偏向乙烯的另一碳原子; 取代基的给、吸电子能力越强, 过渡态偏离对称结构越显著, 活化势垒降低或升高也越大。

关键词 [反应机理](#) [丙烯](#) [丙烯醛](#) [乙烯](#) [量子化学](#) [乙烯 P](#) [分子轨道理论](#) [甲酸 P](#) [过氧化物](#) [硝基烃](#) [金属键](#) [亲电反应](#) [MINDO-3法](#)

分类号 [0641](#)

A quantum chemical study of RCH=CH₂ epoxidation by peroxyacid

HONG SANGUO, FU XIAOYUAN

Abstract MINDO/3 MO method has been used to study the reactions of peroxyformic acid with ethylene and substituted ethylenes. The results show that the reactions of RCH=CH₂ (R = H, Me, CHO, NO₂) with peroxyformic acid are electrophilic reactions. The activation energy decreases with R being electron donating substituent, while it increases by electron withdrawing substituents. Besides, when R = H, the transition structure (TS1) possesses local symmetry, as for R = Me, CHO, NO₂, this symmetry no longer exists.

Key words [REACTION MECHANISM](#) [PROPENE](#) [PROPENAL](#) [ETHYLENE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [ETHYLENE P](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [FORMIC ACID P](#) [PEROXIDE](#) [NITRO HYDROCARBON](#) [METALLIC BONDS](#) [ELECTROPHILIC REACTION](#)

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

- [洪三国](#)
- [傅孝愿](#)