

二环丁烷[1.1.0]开环反应的量子化学研究

唐作华,陈建设,孙泽民,田安民,鄢国森

四川大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用MNDO方法研究了二环丁烷[1.1.0]开环反应的反应途径,并优化了该反应的反应物、产物和过渡态的结构,在理论上证明了此开环反应的反应机理。

关键词 [量子化学](#) [开环反应](#) [环丁烷 P](#) [过渡态](#) [反应途径](#) [MNDO方法](#)

分类号 [0641](#)

A quantum chemical study on ring opening reaction of the bicyclobutane[1.1.0]

TANG ZUOHUA, CHEN JIANSHE, SUN ZEMIN, TIAN ANMIN, YAN GUOSEN

Abstract MNDO method has been employed to study reaction pathway and to optimize structure of reactant, transition state and product of ring opening reaction for the bicyclobutane [1.1.0]. The reaction mechanism has been shown by theory.

Key words [QUANTUM CHEMISTRY](#) [RING CLEAVAGE REACTION](#) [CYCLOBUTANE P](#) [TRANSITION STATE](#) [REACTION PATH](#) [MNDO METHOD](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(392KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“量子化学”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [唐作华](#)
- [陈建设](#)
- [孙泽民](#)
- [田安民](#)
- [鄢国森](#)