

丙烯醛光致脱羰机理的量子化学研究

李来才,黄忠平,唐作华

四川师范大学化学系;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 用量子化学方法研究了丙烯醛基态和激发态的反应途径,

通过比较不同反应途径的反应势垒和中间产物构型的稳定性,从理论上得出该反应的反应机理。

关键词 [反应机理](#) [丙烯醛](#) [量子化学](#) [激发态](#) [构型](#) [势垒](#) [基态](#) [脱羰基化](#) [过渡态](#) [反应途径](#) [AM1](#)

分类号 [0621.16](#) [0641](#)

## Quantum chemical study on the tautomeric mechanism of photodecarbonylation reaction of acrolein

LI LAICAI,HUANG ZHONGPING,TANG ZUOHUA

**Abstract** AM1 method has been used to study the reaction pathway of acrolein in the basis state and the excited states. Comparing different reaction barriers and intermediate-products stability, we have deduced the mechanism theoretically.

**Key words** [REACTION MECHANISM](#) [PROPENAL](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [EXCITED STATE CONFIGURATION](#) [POTENTIAL BARRIER](#) [GROUND STATE](#) [DECARBONYLATION](#) [TRANSITION STATE](#) [REACTION PATH](#) [AM1](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(327KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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

· [李来才](#)

· [黄忠平](#)

· [唐作华](#)