

## 天冬氨酸热解机理的MNDO研究

王辉宪,罗明道,屈松生,欧阳礼,罗大林

武汉大学化学系

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方法全优化计算了天冬氨酸及其热解的中间产物和产物分子的几何构型.通过对计算结果如键长,键级,双原子作用能以及总能量与键长 $R\sim C\sim\sim C,R\sim C\sim\sim N$ 变化关系的分析,提出了天冬氨酸的热解机理,与实验结果基本相符,但关于中间产物的热解,我们认为很可能是先失去 $CO\sim 2$ ,而不是CO

**关键词** [计算机应用](#) [天冬氨酸](#) [几何异构](#) [MNDO](#) [热解机理](#)

分类号 [0642](#) [0641](#)

## Studies on thermolysis of asparaginic acid by MNDO method

WANG HUIXIAN,LUO MINGDAO,QU SONGSHENG,OU YANGLI,LUO DALIN

**Abstract** The mol. geometries of asparaginic acid, thermolysis intermediates and the end products were optimized by MNDO method. The mechanism of thermolysis was discussed.

**Key words** [COMPUTER APPLICATIONS](#) [ASPARTIC ACID](#) [GEOMETRICAL ISOMERISM](#)

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“计算机应用”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [王辉宪](#)
- [罗明道](#)
- [屈松生](#)
- [欧阳礼](#)
- [罗大林](#)