

D-葡萄糖热裂解生成丙烯醛的理论研究

Pyrolysis of D-Glucose to Acrolein

摘要点击 291 全文点击 148 投稿时间: 2011-4-25 采用时间: 2011-5-4

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/03/249-252

中文关键词 [D-葡萄糖](#) [热裂解](#) [丙烯醛](#) [反应机理](#) [密度泛函](#) [XYG3](#)

英文关键词 [D-glucose](#) [Pyrolysis](#) [Acrolein](#) [Reaction mechanism](#) [Density functional theory](#) [XYG3](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
沈翀	固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学化工学院, 厦门361005	
张颖	固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学化工学院, 厦门361005	
傅钢	固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学化工学院, 厦门361005	
徐昕*	固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学化工学院, 厦门361005	xinxu@xmu.edu.cn

中文摘要

用新一代密度泛函方法(XYG3)考察了D-葡萄糖热裂解生成丙烯醛的各种可能途径. 该反应最有利的路径为: 葡萄糖首先异构成果糖, 然后经周环Grob碎片化及电环化脱水, 最终生成丙烯醛. 预测丙烯醛主要源自D-葡萄糖上C4、C5和C6, 与¹³C同位素标记实验相符.

英文摘要

Despite of its great importance, the detailed molecular mechanism for carbohydrate pyrolysis remains poorly understood. We perform a density functional study with a newly developed XYG3 functional on the processes for D-glucose pyrolysis to acrolein. The most feasible reaction pathway starts from an isomerization from D-glucose to D-fructose, which then undergoes a cyclic Grob fragmentation, followed by a concerted electrocyclic dehydration to yield acrolein. This mechanism can account for the known experimental results.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计