

研究论文

多氯代菲分子结构和热力学性质的密度泛函理论研究

王 岩*, a 曾小兰 a 方德彩 b

(a 信阳师范学院化学化工学院 信阳 464000)

(b 北京师范大学化学学院 北京 100875)

收稿日期 2008-8-3 修回日期 2008-11-19 网络版发布日期 2009-7-20 接受日期 2009-1-12

摘要

采用密度泛函理论方法在B3LYP/6-311G(d, p)水平上对527个多氯代菲分子的几何结构进行了全优化并计算得到它们的热力学性质(等容热容(C_v))、熵(S)、标准生成焓($\Delta_f H^\ominus$)和标准生成Gibbs自由能($\Delta_f G^\ominus$), 研究了这些性质与取代的氯原子数目和位置的关系, 根据各异构体的相对标准生成Gibbs自由能($\Delta_r f G^\ominus$)的大小, 得到它们的热力学稳定性顺序. 计算结果表明: 绝大多数多氯代菲分子具有非平面的几何构型, 在多氯代菲分子中存在三种类型的分子内弱相互作用(H...H、C—H...Cl和Cl...Cl相互作用), 随着分子中取代的氯原子数目的增加, 多氯代菲最稳定异构体的 $\Delta_f H^\ominus$ 和 $\Delta_f G^\ominus$ 开始时逐渐减小, 然后又快速增加. 具有相同数目氯原子的多氯代菲异构体的 $\Delta_f H^\ominus$ 和 $\Delta_f G^\ominus$ 与氯原子的取代位置有很大的关系. 多氯代菲异构体的相对热力学稳定性主要由分子内的离域 π 键和Cl...Cl核排斥作用的强弱决定.

关键词

[多氯代菲](#) [分子结构](#) [热力学性质](#) [相对稳定性](#) [密度泛函理论](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

方德彩 wangysanxytc@163.com

作者个人主页:

王 岩*; a 曾小兰 a 方德彩 b

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(393KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献 \[PDF\]](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含 “](#)

[多氯代菲” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王 岩, 曾小兰, 方德彩](#)