

DMP与DEP在凝聚相中裂解反应理论研究: 隧道效应与溶剂效应

姜辉;吴韬;李浩然

浙江大学化学系, 杭州 310027

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)B3LYP方法, 以极化连续模型(PCM)和导体反应场模型(COSMORS)的溶剂模型为基础, 结合反应动力学研究了2,2-二甲氧基丙烷(DMP)与2,2-二乙氧基丙烷(DEP)在凝聚相(溶液相)中的裂解反应. 结果表明, 四元环过渡态裂解反应机理是DMP与DEP裂解反应的主反应通道, 溶剂效应和隧道效应对液相中的裂解反应速率有较大的影响, 而且溶剂效应的影响更显著. 在凝聚相反应理论研究中, 溶剂效应和量子隧道效应都是不能忽略的因素.

关键词: 凝聚相 溶剂效应 隧道效应 速率常数 裂解反应

收稿日期 2006-01-23 修回日期 2006-03-14 网络版发布日期 2006-09-04

通讯作者: 李浩然 Email: lihr@zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(294KB\)](#)

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](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [凝聚相](#)

▶ [溶剂效应](#)

▶ [隧道效应](#)

▶ [速率常数](#)

▶ [裂解反应](#)

本文作者相关文章

▶ [姜辉](#)

▶ [吴韬](#)

▶ [李浩然](#)