

研究论文

OH抽提1-戊醇分子中 α -H和 β -H引发的大气反应机理的理论研究

赵 燕^a 王 慧^b 孙孝敏^a 张庆竹^{*,a} 王文兴^a

(^a山东大学环境研究院 济南 250100)

(^b清华大学环境科学与工程系 北京 100080)

收稿日期 2008-5-13 修回日期 2008-12-9 网络版发布日期 2009-1-28 接受日期 2008-12-24

摘要

采用量子化学密度泛函理论研究了OH抽提1-戊醇分子中 α -H和 β -H引发的大气反应的机理. 在B3LYP/6-311+G(3df,2p)//B3LYP/6-31G(d)水平上对该反应体系的反应物、中间体、过渡态及产物进行了几何构型优化和频率计算, 给出了各反应通道的自由能剖面图. 计算结果表明: OH抽提1-戊醇分子中 α -H和 β -H引发的反应通道的主要产物分别为1-戊醛和1-丁醛; 生成的产物极性和水溶性增强, 易通过成核、水合或吸附反应形成二次有机气溶胶.

关键词

[1-戊醇](#) [反应机理](#) [单分子分解](#) [异构化反应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张庆竹 zqz@sdu.edu.cn

作者个人主页:

赵 燕^a 王 慧^b 孙孝敏^a 张庆竹^{*,a} 王文兴^a

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(303KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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 “](#)

[1-戊醇” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [赵燕, 王 慧, 孙孝敏, 张庆竹, 王文兴](#)