

[本期目录] [下期目录] [过刊浏览] [高级检索]

[打印本页] [关闭]

论文

二氯二氰基苯醌及其阴离子自交换电子转移反应的理论研究

齐琳琳, 王全德, 王静波, 傅克祥, 何福城, 李象远

四川大学化工学院, 成都 610065

摘要:

基于非平衡溶剂化能的约束平衡方法和溶剂重组能的新表达式, 实现了电子转移反应溶剂重组能的数值解, 研究了二氯二氰基苯醌(DDQ)及其阴离子体系DDQ-之间的自交换电子转移反应。考虑了DDQ与DDQ-分子以平行方式形成受体-给体络合物时的两种构型。引入线性反应坐标, 计算了该反应在不同溶剂中的溶剂重组能。基于两态变分模型得到了反应的电子耦合矩阵元。根据电子转移动力学模型, 计算了该自交换电子转移反应的速率常数。

关键词: 非平衡溶剂化 二氯二氰基苯醌 电子转移 溶剂重组能

Theoretical Studies on Self-exchange Electron Transfer Between 2,3-Dicyano-5,6-dichloro-p-benzoquinone and Its Radical Anion

QI Lin-Lin, WANG Quan-De, WANG Jing-Bo, FU Ke-Xiang, HE Fu-Cheng, LI Xiang-Yuan*

College of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China

Abstract:

We studied the self-exchange electron transfer reaction between 2,3-dichloro-5,6-dicyano-1,4-benzoquinone and its radical anion, on the basis of the non-equilibrium solvation theory in virtue of a constrained equilibrium state. Two different conformations of the parallel donor-acceptor complexes were considered. Using the new non-equilibrium solvation model combined with the linear reaction coordinate, we calculated the solvent reorganization energy in different solvents. The electronic coupling are obtained through the two-state model. The self-exchange electron transfer reaction rate constants in different solvents were calculated and the results correlate well with the experimental values.

Keywords: Non-equilibrium solvation 2,3-Dicyano-5,6-dichloro-p-benzoquinone Electron transfer Solvent reorganization energy

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(419KB)

[HTML全文](OKB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

► 非平衡溶剂化

► 二氯二氰基苯醌

► 电子转移

► 溶剂重组能

本文作者相关文章

► 齐琳琳

► 王全德

► 王静波

► 傅克祥

► 何福城

► 李象远

► 齐琳琳

► 王全德

► 王静波

► 傅克祥

► 何福城

► 李象远

PubMed

Article by

基金项目:

通讯作者: 李象远

作者简介:

参考文献:

Marcus R. A., Sutin N.. Biochim. Biophys. Acta.[J], 1985, 811: 265—322
 Marcus R. A.. J. Chem. Phys.[J], 1956, 24: 966—978
 Marcus R. A.. J. Chem. Phys.[J], 1956, 24: 979—989
 Formasinho S. J., Arnaut L. G., Fausto R.. Prog. Reaction Kinetics[J], 1998, 23: 1—90
 Paulson B. P., Miller J. R., Gan W. X., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2005, 127: 4860—4868
 Basilevsky M. V., Chudinov G. E., Rostov I. V., et al.. J. Mol. Struct.(Theochem.)[J], 1996, 371: 191—203

Li X. Y., Fu K. X.. J. Theor. Comput. Chem.[J], 2005, 4: 907—983
 ZHU Quan(朱权), FU Ke-Xiang(傅克祥), LI Xiang-Yuan(李象远). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(2): 274—286
 Gramp G., Landgraf S., Rasmussen K.. J. Chem. Soc. Perkin. Trans 2[J], 1999, 9: 1897—1899
 Ma S. H., Zhang X. D., Xu H., et al.. J. Photochem. Photobiol. A: Chem.[J], 2001, 139: 97—104
 Jackson J. D.. Classical Electrodynamics, 3rd ed.[M], New York: John Wiley & Sons, 1999
 Leontovich M. A.. An Introduction to Thermodynamics, 2nd ed.[M], Moscow: Gittl Publ., 1950
 TU Zhe-Yan(涂喆研), LI Xiang-Yuan(李象远), FU Ke-Xiang(傅克祥), et al.. Acta Phys. Chim. Sin.(物理化学学报)[OL], <http://www.whxb.pku.edu.cn/qikan/manage/wenzhang/whxb20081229.pdf>
 Tomasi J., Mennucci B., Cammi R.. Chem. Rev.[J], 2005, 105: 2999—3093
 Schmidt M. W., Baldridge K. K., Boatz J. A., et al.. J. Comput. Chem.[J], 1993, 14: 1347—1363
 Nelsen S. F., Blackstock S. C., Kim Y.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1987, 109: 677—682
 Rhee Y. M., DiStasio R. A., Lochan R. C., et al.. Chem. Phys. Lett.[J], 2006, 426: 197—203
 Rosokha S. V., Kochi J. K.. Acc. Chem. Res.[J], 2008, 41: 641—653
 Farazdel A., Dupuis M., Clementi E., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1990, 112: 4206—4214
 Amini A., Harriman A.. J. Photochem. Photobiol. C.[J], 2003, 4: 155—177
 Eberson L.. Electron Transfer Reactions in Organic Chemistry[M], Berlin Heidelberg, New York: Springer, 1987: 30

本刊中的类似文章

1. 莫凤珊,刘晓塘,石春山 .掺杂铕和铽的卤硼酸盐荧光体的制备及光谱特征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1519-1522
2. 马新勇, 汪俊, 陈波, 方晓红 .单分子荧光成像研究凝血酶核酸适体的折叠[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1852-1856
3. 张美芹; 刘卉; 胡虎; 谢书宝; 静平; 寇元; 邵元华.应用扫描电化学显微镜研究电子在室温离子液体与1,2-二氯乙烷混合溶液/水相界面上的转移反应[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1355-1359

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
				ugg online	ugg boc online buy ugg boots
				ugg boots sale	ugg boc cardy ugg boots tall
				ugg boots	ugg knights