

SO₂ 钳合反应机理的密度泛函研究

王文峰; 章永凡; 李俊篔

福州大学化学系, 结构化学国家重点实验室, 福州 350002

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)在B3LYP/6-311+G**水平上计算了SO₂与2,4-己二烯之间的钳合反应, IRC计算结果表明该反应是协同反应. 反应中, 这两个反应物同时把自己的HOMO电子填入对方的LUMO轨道, 这与传统的4+2环加成机理不同. 反应前SO₂的HOMO轨道与2,4-己二烯的LUMO轨道之间能级相差很大(8.4 eV), 但随着反应进行, 2,4-己二烯的反键LUMO轨道逐渐演变成一个成键轨道, 能级下降, 使得SO₂的HOMO上电子可以向该轨道流动. 反应的净结果是有0.23e⁻的负电荷由SO₂向2,4-己二烯转移.

关键词: SO₂ 2,4-己二烯 钳合反应 机理 轨道相互作用

收稿日期 2005-05-20 修回日期 2005-09-01 网络版发布日期 2006-01-15

通讯作者: 李俊篔 Email: quant@fzu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张文华; 彭江杰; 马运生; 郝立庆; 庄叔贤. 硫化CoMo/Al₂O₃-TiO₂催化剂上CO催化还原SO₂的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(10): 901-906
2. 施世明; 陈德应; 郑企克; 秦启宗. SO₂的简并四波混频光谱[J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 293-295
3. 嵇世山; 翁端; 谭瑞琴; 张志强; 曹立礼. La-Ce-Cu系列催化剂SO₂中毒机理研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(06): 527-533

扩展功能

本文信息

PDF(807KB)

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

▶ SO₂

▶ 2,4-己二烯

▶ 钳合反应

▶ 机理

▶ 轨道相互作用

本文作者相关文章

▶ 王文峰

▶ 章永凡

▶ 李俊篔