

羟基负离子与苯分子的反应机理

王俊霞; 于锋; 刘静; 刘世林; 周晓国

中国科学技术大学化学物理系, 合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026

摘要:

在G3MP2B3理论水平下研究了羟基负离子和苯的反应机理, 系统地分析了该反应体系中可能存在的主要热力学产物通道. 计算结果证实了前人的实验观测结果, 其主要产物是[C6H6...OH]-络合物, 质子转移和置换氢的产物通道为吸热过程, 在较低实验碰撞能量的情况下难以发生, 而生成氢气的反应通道虽然是强放热过程(-119.5 kJ·mol⁻¹), 但其相应的反应能垒较高而无法发生. 计算对比了羟基负离子和氧负离子、氟负离子抽取苯分子中质子的机理所存在的差异, 并结合Mulliken电荷布居分析研究了其中涉及电子交换过程. 此外, 还对比分析了羟基负离子、羟基自由基与苯反应不同的机理.

关键词: 羟基负离子 苯 反应机理

收稿日期 2008-03-24 修回日期 2008-04-18 网络版发布日期 2008-06-11

通讯作者: 周晓国 Email: xzhou@ustc.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\(317KB\)](#)

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

- ▶ [羟基负离子](#)
- ▶ [苯](#)
- ▶ [反应机理](#)

本文作者相关文章

- ▶ [王俊霞](#)
- ▶ [于锋](#)
- ▶ [刘静](#)
- ▶ [刘世林](#)
- ▶ [周晓国](#)