

DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理

蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华

北京化工大学可控化学反应科学与技术基础教育部重点实验室,北京 100029

摘要:

利用密度泛函方法(DFT)分别在B3LYP/6-31G**和B3LYP/6-311++G**的计算水平上优化了离子液体中1-乙基-3-甲基咪唑阳离子(EMIM⁺)催化丁烯双键异构反应过程中的反应物、产物以及过渡态的几何构型,分析了反应过程中键参数的变化.通过振动分析对平衡态和过渡态进行了验证,并得到了零点能.通过计算内禀反应坐标(IRC),确认了对应于过渡态的反应物和产物.计算结果表明,EMIM⁺催化丁烯双键异构可以基元反应的方式一步完成,1-丁烯异构化为2-丁烯的活化能约为192 kJ·mol⁻¹,逆反应活化能约为208 kJ·mol⁻¹,可在室温或高于室温条件下进行.

关键词: 1-乙基-3-甲基咪唑阳离子(EMIM⁺) 离子液体 丁烯 双键异构 过渡态 密度泛函理论

收稿日期 2004-01-07 修回日期 2004-03-29 网络版发布日期 2004-08-15

通讯作者: 陈标华 Email: chenbh@mail.buct.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(1465KB)

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

- ▶ 1-乙基-3-甲基咪唑阳离子(EMIM⁺)
- ▶ 离子液体
- ▶ 丁烯
- ▶ 双键异构
- ▶ 过渡态
- ▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

- ▶ 蒲敏
- ▶ 刘坤辉
- ▶ 李会英
- ▶ 陈标华