

四氢化萘热解中甲基茚满生成机理的密度泛函计算

 贾建波¹, 李风海¹, 曾凡桂², 郭红玉¹

1. 河南理工大学, 河南 焦作 454000;

2. 太原理工大学煤科学与技术教育部和山西省重点实验室 地球科学与工程系, 山西 太原 030024

A DFT study on the mechanism of methyl indan formation in tetralin pyrolysis

 JIA Jian-bo¹, LI Feng-hai¹, ZENG Fan-gui², Guo Hong-yu¹

1. Henan Polytechnic University School, Jiaozuo 454000, China;

2. Key Laboratory of Coal Science and Technology of Ministry of Education and Shanxi Province, Taiyuan University of Technology, Department of Earth Science & Engineering, Taiyuan 030024, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章
- 点击分布统计
- 下载分布统计

 全文: [PDF \(1157 KB\)](#) | [HTML \(1 KB\)](#) 输出: [BibTeX](#) | [EndNote \(RIS\)](#) [背景资料](#)

摘要 采用量子化学密度泛函方法对四氢化萘热解过程中甲基茚满的生成机理进行计算。结果表明,热解产物甲基茚满的主要存在形式是1-甲基茚满;其主要生成反应途径是,首先通过自由基和四氢化萘间的氢转移反应生成β-四氢化萘基,然后β-四氢化萘基上的氢化芳环经缩环反应生成1-甲基茚满。提高温度能促进1-甲基茚满生成反应的进行,但对其生成反应路径没有太大影响。

关键词: 四氢化萘 甲基茚满 热解机理 密度泛函理论

Abstract: The mechanism of methyl indan formation during tetralin pyrolysis was investigated by using the density functional theory (DFT). The results showed that 1-methyl indan is the main conformation of methyl indan products from tetralin pyrolysis. As the main route of 1-methyl indan formation during tetralin pyrolysis, β tetralin radical was first formed through H abstraction by radical species from tetralin, which then endures a ring contraction reaction to form 1-methyl indan. High temperature can promote the formation of 1-methyl indan, but has little effect on the formation routes of 1-methyl indan.

Key words: tetralin methyl indan pyrolysis mechanism density function theory

收稿日期: 2012-03-28;

基金资助:

国家自然科学基金(41072116, 40772097, 40572094, 90410018); 国家自然科学基金青年基金(41102092,41002047); 高等学校博士学科点专项科研基金(20091402110002); 河南理工大学博士基金。

通讯作者: 曾凡桂, Tel: 0351-6010468, E-mail: zengfangui@tyut.edu.cn. E-mail: zengfangui@tyut.edu.cn

引用本文:

贾建波, 李风海, 曾凡桂等. 四氢化萘热解中甲基茚满生成机理的密度泛函计算[J]. 燃料化学学报, 2012, 40(10): 1188-1193.

JIA Jian-bo, LI Feng-hai, ZENG Fan-gui et al. A DFT study on the mechanism of methyl indan formation in tetralin pyrolysis[J]. J Fuel Chem Technol, 2012, 40(10): 1188-1193.

链接本文:

<http://rlhxxb.sxicc.ac.cn/CN/> 或 <http://rlhxxb.sxicc.ac.cn/CN/Y2012/V40/I10/1188>

[1] 张晓静. 煤炭直接液化溶剂的研究[J]. 洁净煤技术, 2011, 17(4): 26-29. (ZHANG Xiao-jing. Study on solvents for direct coal liquefaction[J]. Clean Coal Technology, 2011, 17(4): 26-29.)








[2] 王绍清, 唐跃刚, Harold H Schobert, 郭琴, 王凤娟. 富含树皮体和半丝质体媒的液化反应性和¹³C-核磁共振分析的研究[J]. 燃料化学学报. 2010, 38(2): 129-133. (WANG Shao-qing, TANG Yue-gang, SCHOBERT H H, GUO Qin, WANG Feng-juan. Liquefaction reactivity and ¹³C-NMR of coals

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 贾建波
- ▶ 李风海
- ▶ 曾凡桂
- ▶ 郭红玉

- [3] 徐蓉, 王国龙, 鲁锡兰, 李洋洋, 张德祥. 神华煤液化残渣的加氢反应动力学[J]. 化工学报, 2009, 60(11): 2749-2754. (XU Rong, WANG Guo-long, LU Xi-lan, LI Yang-yang, ZHANG De-xiang. Hydrogenation kinetics of Shenhua coal liquefaction residue [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering(China), 2009, 60(11): 2749-2754.)
- [4] LI X, HU S X, JIN L J, HU H Q. Role of iron-based catalyst and hydrogen transfer in direct coal liquefaction[J]. Energy Fuels, 2008, 22(2): 1126-1129. 
- [5] HOOPER J R, HENDRIK A J, BATAERD J, EVANS D G. Thermal dissociation of tetralin between 300 and 450°C[J]. Fuel, 1979, 58(2): 132-138. 
- [6] CURRAN G.P, STRUCK R T, GORIN E. Mechanism of hydrogen-transfer process to coal and coal extract[J]. Ind Eng Chem Process Des Dev, 1967, 6(2): 166-173. 
- [7] BOUNACEUR R, SCACCHI G, MARQUAIRE P M, DOMIN F. Mechanistic modeling of the thermal cracking of tetralin[J]. Ind Eng Chem Res, 2000, 39(11): 4152-4165. 
- [8] POUTSMA M.L. Progress toward the mechanistic description and simulation of the pyrolysis of tetralin[J]. Energy Fuels, 2002, 16(4): 964-996.
- [9] POUTSMA M L. Free-radical thermolysis and hydrogenolysis of model hydrocarbons relevant to processing of coal[J]. Energy Fuels, 1990, 4(2): 113-131. 
- [10] YEN Y K, FURLANI D E, WELLER S W. Batch autoclave studies of catalytic hydrodesulfurization of coal[J]. Ind Eng Chem Prod Dev, 1976, 15(1): 24-28.
- [11] BENJAMIN B M, HAGAMAN E W, RAAEN V F, COLLINS C J. Pyrolysis of tetralin[J]. Fuel, 1979, 58(5): 386-390. 
- [12] PENNINGER J M L. New aspects of the mechanism for the thermal hydrocracking of indane and tetralin[J]. Int J Chem Kinet, 1982, 14(7): 761-780. 
- [13] 杨晓林, 杨惠星, 韩德刚. 四氢萘(C₁₀H₁₂)热解反应动力学研究[J]. 物理化学学报, 1985, 1(3): 249-257. (YANG Xiao-lin, YANG Hui-xing, HAN De-gang. Kinetics and mechanism of thermolysis of tetralin[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 1985, 1(3): 249-257.)
- [14] 杨晓林, 应立明, 覃志伟. 四氢萘热解反应机理研究[J]. 化学学报, 1990, 48(5): 441-446. (YANG Xiao-lin, YING Li-ming, TAN Zhi-wei. The study of mechanism for the thermolysis of tetralin[J]. Acta Chimica Sinica, 1990, 48(5): 441-446.)
- [15] 杨晓林, 杨惠星, 韩德刚. 四氢萘热解中间产物及其反应机理的进一步研究[J]. 物理化学学报, 1985, 1(6): 571-574. (YANG Xiao-lin, YANG Hui-xing, HAN De-gang. The study of the intermediates reactions and the reaction mechanism in the thermolysis of tetraline [J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 1985, 1(6): 571-574.)
- [16] 贾建波, 曾凡桂, 李美芬, 谢克昌. 煤中芳核侧链模型化合物丁基萘的初次热解[J]. 化工学报, 2009, 60(12): 3082-3088. (JIA Jian-bo, ZENG Fan-gui, LI Mei-fen, XIE Ke-chang. Initial pyrolysis mechanism of aliphatic group on aromatic cluster in coal structure by using butyl anthracene as model compound[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering(China), 2009, 60(12): 3082-3088.)
- [17] 傅献彩, 沈文霞, 姚天扬. 物理化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1993: 806-811. (FU Xian-cai, SHEN Wen-xia, YAO Tian-yang. Physical chemistry [M]. Beijing: Higher Education Press, 1993: 806-811.)
- [1] 罗希韬, 王志奇, 武景丽, 吴晋沪. 基于热重红外联用分析的PE、PS、PVC热解机理研究[J]. 燃料化学学报, 2012, 40(09): 1147-1152.
- [2] 杜梅芳, 张影, 樊俊杰, 吴高贺, 侯宁普, 鲁贵林, 张忠孝. 气体再燃低NO_x燃烧中NO与NH₃的反应机理研究[J]. 燃料化学学报, 2012, (08): 935-942.
- [3] 黄金保, 童红, 曾桂生, 谢宇, 李伟民. 丁醇醛和丁醇酸热解形成CO和CO₂机理的密度泛函理论研究[J]. 燃料化学学报, 2012, (08): 979-984.
- [4] 黄金保, 刘朝, 曾桂生, 谢宇, 童红, 李伟民. 左旋葡聚糖热解机理的密度泛函理论研究[J]. 燃料化学学报, 2012, 40(07): 807-815.
- [5] 刘兴武, 李永旺, 王建国, 霍春芳. 第一性原理研究C在Fe(111)表面和次表面的积炭机理[J]. 燃料化学学报, 2012, 40(02): 202-209.
- [6] 袁金焕, 滕波涛, 赵越, 赵云, 罗孟飞. 贵金属原子在CeO₂(111)表面吸附的密度泛函理论研究[J]. 燃料化学学报, 2012, 40(01): 124-128.
- [7] 赵训华, 李永旺, 王建国, 霍春芳. Fe(100)表面Cu单层膜上CO的吸附|解离以及C-C偶合反应[J]. 燃料化学学报, 2011, 39(12): 956-960.
- [8] 黄金保, 刘朝, 魏顺安, 黄晓露, 李豪杰. 纤维素热解形成左旋葡聚糖机理的理论研究[J]. 燃料化学学报, 2011, 39(08): 590-594.
- [9] 赵炳坤, 陈镇, 吴玉龙, 杨明德, 封伟. 甲氧基在Rh(111)表面吸附的密度泛函研究[J]. 燃料化学学报, 2010, 38(03): 365-369.
- [10] 杨涛, 温晓东, 任君, 李永旺, 王建国, 霍春芳. Fe₃O₄(111)|(110)和(001)表面结构的密度泛函理论研究[J]. 燃料化学学报, 2010, 38(01): 121-128.
- [11] 杨涛, 温晓东, 曹东波, 李永旺, 王建国, 霍春芳. H₂O在Fe₃O₄(111)表面吸附的结构及热力学研究[J]. 燃料化学学报, 2009, 37(04): 506-512.
- [12] 包丽丽, 霍春芳, 邓春梅, 李永旺. Fe₂C晶体及低指数晶面的结构与稳定性研究[J]. 燃料化学学报, 2009, 37(01): 104-108.
- [13] 李洁, 杜梅芳, 闫博, 张忠孝. 添加硼砂助熔剂煤灰熔融性的量子化学与实验研究[J]. 燃料化学学报, 2008, 36(05): 519-523.
- [14] 宋薇, 刘建国, 聂永丰. 含油污泥的热解特性研究[J]. 燃料化学学报, 2008, 36(03): 286-290.
- [15] 唐克, 宋丽娟, 段林海, 李秀奇, 桂建舟, 孙兆林. 杂原子Y分子筛的二次合成及其吸附脱硫性能(II)[J]. 燃料化学学报, 2007, 35(05): 624-627.

