

研究报告

氢-苯乙烯体系中氢-氚同位素交换反应的热力学研究

阮文^{1, 2}; 罗文浪^{1, 2}; 张莉¹; 朱正和^{1, *}

1. 四川大学 原子与分子物理研究所, 成都 610065

2. 井冈山大学 数理学院, 江西 吉安 343009

收稿日期 2007-11-19 修回日期 2008-6-18 网络版发布日期: 2008-12-14

摘要 采用6-311G全电子基函数和B3p86方法对聚苯乙烯-二乙烯基苯(polystyrene-divinylbenzene, SDB)单体之一的苯乙烯分子结构进行优化计算。根据热力学原理,计算得到SDB官能团分子氢氟取代反应在不同温度下的标准生成自由能函数、反应平衡常数及氚气和氢气的反应平衡压力比。结果表明,温度的升高不利于氢氟取代反应 $T_2(g)+SDB_{(H_2)}(s)\rightarrow H_2(g)+SDB_{(T_2)}(s)$ 正向进行,这与Pt/SDB疏水催化剂在氢-水同位素交换的催化反应实验过程中的氢氟取代研究结论一致。

关键词 [氢-苯乙烯体系](#); [氢氟取代反应](#); [热力学函数](#); [平衡常数](#); [反应平衡分压比](#)

分类号 [0642](#)

Thermodynamic Study on Tritium-Hydrogen Isotope Exchange in H₂-Vinylbenzene System

RUAN Wen^{1, 2}; LUO Wen-lang^{1, 2}; ZHANG Li¹; ZHU Zheng-he^{1, *}

1. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China;

2. College of Mathematics and Physics, Jinggangshan University, Ji'an 343009, China

Abstract

The present paper reports a thermodynamic study for the substitution of tritium for hydrogen from vinylbenzene (VB)—one of the monomers of polystyrene-divinylbenzene (SDB) by means of the density function theory (DFT) B3P86 method at 6-311G base level. The thermodynamic functions are calculated at different temperature. The standard formation functions, the equilibrium constants and

the equilibrium pressure ratios of tritium and hydrogen gas for monomer VB molecules at different temperature have been calculated. The calculation

results show that the elevation of temperature does not favor the substitution reaction of $T_2(g)+SDB_{(H_2)}(s)\rightarrow H_2(g)+SDB_{(T_2)}(s)$. This conclusion is in good agreement with some experimental investigations.

Key words [H₂-vinylbenzene system](#) [substitution reaction of tritium and hydrogen](#) [thermodynamic functions](#) [equilibrium constants](#) [equilibrium pressure ratios](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [\[PDF全文\]\(124KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ 本刊中 [包含“氢-苯乙烯体系; 氢氟取代反应; 热力学函数; 平衡常数; 反应平衡分压比”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [阮文](#)

· [罗文浪](#)

· [张莉](#)

· [朱正和](#)

通讯作者 朱正和^{1,*}