

研究论文

多氯代吩噁嗪热力学性质的密度泛函理论研究

仇静^a 刘辉^b 王遵尧^{*},^b 王连生^c 于红霞^c

(^a盐城工学院化学与生物工程学院 盐城 224003)

(^b嘉兴学院生物与化学工程学院 嘉兴 314001)

(^c南京大学环境学院 南京 210093)

收稿日期 2008-4-28 修回日期 2008-7-10 网络版发布日期 2008-12-28 接受日期 2008-8-14

摘要

在B3LYP/6-31G*水平上对135个多氯代吩噁嗪(PCPXs)系列化合物进行了全优化和振动分析计算,得到各分子在298.15 K, 1.013×10⁵ Pa标准状态下的热力学性质.设计等键反应,计算了PCPXs系列化合物的标准生成焓($\Delta_f H^\circ$)和标准生成自由能($\Delta_f G^\circ$),研究了这些参数与氯原子的取代位置及取代数目(NPCS)之间的关系,结果表明: $\Delta_f H^\circ$ 、 $\Delta_f G^\circ$ 与NPCS之间有很强的相关性.根据异构体标准生成自由能的相对大小,从理论上求得异构体的相对稳定性.以Gaussian 03程序的输出文件为基础,采用统计热力学程序计算了PCPXs化合物在200 K至1800 K的摩尔恒压热容($C_{p,m}$),并用最小二乘法求得 $C_{p,m}$ 与温度之间的相关方程,发现 $C_{p,m}$ 与 T , $T-1$ 和 $T-2$ 之间有着很好的相关性.

关键词

[多氯代吩噁嗪](#) [密度泛函理论\(DFT\)](#) [氯原子取代位置方法](#) [热力学性质](#) [相对稳定性](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王遵尧 wangzun315cn@163.com

作者个人主页:

仇静^a 刘辉^b 王遵尧^{*};^b 王连生^c 于红霞^c

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(374KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[多氯代吩噁嗪” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [仇静,刘辉,王遵尧,王连生,于红霞](#)