

研究论文

合成聚甲醛二甲基醚反应热力学的理论计算

雷艳华 孙清 陈兆旭 沈俭一\*

(南京大学化学化工学院 南京 210093)

收稿日期 2008-7-14 修回日期 2008-10-27 网络版发布日期 2009-6-18 接受日期 2008-12-9

摘要

采用密度泛函理论(DFT)方法在B3LYP/6-31+G(d,p)水平上对聚甲醛二甲基醚(PODE)系列化合物进行了全优化和振动分析计算, 获得了该系列化合物的最优构型及热力学函数值. 通过设计等键反应计算了PODE的生成热, 并进一步计算了生成PODE的反应平衡常数及转化率, 进而判断这些反应的热力学可行性.

关键词

[聚甲醛二甲基醚\(PODE\)](#) [热力学参数](#) [热力学平衡转化率](#) [密度泛函理论\(DFT\)](#) [等键反应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

沈俭一 [jyshen@nju.edu.cn](mailto:jyshen@nju.edu.cn)

作者个人主页:

雷艳华 孙清 陈兆旭 沈俭一\*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDE\(343KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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 “](#)

[聚甲醛二甲基醚\(PODE\)”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [雷艳华,孙清,陈兆旭,沈俭一](#)