

Cl₂+2HI=2HCl+I₂反应机理的理论研究

刘红艳; 王遵尧; 刘树深

桂林工学院材料与化学工程系, 桂林 541004; 南京大学环境学院, 南京 210093; 盐城工学院化工系, 江苏 盐城 224003

摘要:

分别在MP2/3-21G**、CCSD(T)/3-21G**//MP2/3-21G**和B3LYP/3-21G**3种水平上, 计算研究了气相反应Cl₂+2HI=2HCl+I₂的机理, 求得一系列四中心和三中心的过渡态. 通过比较六种反应通道的活化能大小, 得到了相同的结论: 双分子基元反应Cl₂+HI@HCl+ICI和ICI+HI@I₂+HCl的最小活化能小于Cl₂、HI和ICI的解离能, 从理论上证明了反应Cl₂+2HI=2HCl+I₂将优先以分子与分子作用形式分两步完成. 用内禀反应坐标(IRC)验证了MP2/3-21G**方法计算得到的过渡态.

关键词: 氯 碘化氢 Ab initio 反应机理 双分子反应

收稿日期 2005-01-04 修回日期 2005-02-21 网络版发布日期 2005-09-15

通讯作者: 王遵尧 Email: wangzun315@163.com

本刊中的类似文章

1. 高保娇;张昕;刘启发.有机电解质在胶束催化聚苯乙烯氯甲基化反应中的作用[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 86-91
2. 曹槐;谢小光.生物金属与胆固醇相互作用的经验势函数计算[J]. 物理化学学报, 1995,11(11): 1044-1047
3. 李武;高世扬;曾忠民;夏树屏.模拟合成盐卤与盐酸反应的热化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(12): 1101-1104
4. 盛六四;齐飞;高辉;罗志勇;张允武.C₂H₃Cl分子团簇内部离子-分子反应产生C₄H₅Cl⁺的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(11): 1004-1007
5. 张锁江;韩钧钧;金银东.NaCl(或KCl)-CH₃OH-H₂O体系的摩尔电导[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 75-80
6. 黄文;顾惕人.电解质水溶液在丙酸十二铵-四氯化碳溶液中的增溶[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 49-53
7. 刘志宏;胡满成;高世扬.2MgO•2B₂O₃•MgCl₂•14H₂O-MgCl₂-H₂O体系30℃相平衡[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1116-1119
8. 卓立宏;乔占平;郭应臣;王惠.ErCl₃-CdCl₂-HCl-H₂O的相平衡(25℃)及其固相化合物*[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 616-621
9. 周龙梅;刘宏英;李凤生.Y₂O₃纳米粒子/碳纳米管复合体的制备及其催化高氯酸铵热分解[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 627-630
10. 李勇慧;黄建滨;王传忠;毛敏.易水解类表面活性剂的表面与胶团性质[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 972-977
11. 赵辉;路福绥;李培强.不同因素对高效氯氟氟菊酯微乳液相图的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 475-480
12. 王遵尧;肖鹤鸣;李金山.F+Cl₂->ClF+Cl和Cl'F+Cl->Cl'+ClF的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
13. 胡融刚;黄若双;杜荣归;林昌健.氯离子侵蚀下钢筋在混凝土中腐蚀行为的EIS研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 46-50
14. 李小平;刘志宏;高世扬;胡满成;夏树屏.氯柱硼镁石在87℃水中的溶解及相转化动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 181-184
15. 沈吉静;赵振国;马季铭.O/W微乳中的2,4-二硝基氯苯水解反应[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 257-260
16. 郑康成;张仲钦;沈勇;云逢存.计算多氯代烷烃异构体生成焓的新方法[J]. 物理化学学报, 2001,17(05): 448-452
17. 徐国华;Higashitani Ko.OTS自组装单分子膜形成过程的AFM研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(05): 458-461
18. 魏小兰;张逢星;郭志箴;史启祯.钾镁氯化物(硫酸盐)与脲、水体系的溶度研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 237-242
19. 徐四川;赵新生.在冰表面上硝酸氯和氯化氢反应的机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 5-7
20. 董俊华;曹楚南;林海潮.稀酸溶液中氯离子对工业纯铁的腐蚀剂理研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(03): 279-282
21. 南延青;俞庆森;宗汉兴;林瑞森.氯苯甲酸在水-DMF混合溶剂中的电离热力学[J]. 物理化学学报, 1995,11(01):

扩展功能

本文信息

PDF(249KB)

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

▶ 氯

▶ 碘化氢

▶ Ab initio

▶ 反应机理

▶ 双分子反应

本文作者相关文章

▶ 刘红艳

▶ 王遵尧

▶ 刘树深

- 92-95
22. 李积才; 翟宗玺; 曾忠民; 王鲁英. 盐湖盐类水溶液298.15K时稀释热和表观摩尔焓的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 759-764
23. 李春光; 崔刚. [CuCl₃CPZ(O)H]络合物的合成及电化学行为的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 755-758
24. 张雅明; 王延儒; 时钧. 氯化钙/水-醇溶液稀释热[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 555-559
25. 阮文娟; 朱志昂; 黄小群; 陈荣梯; 江长青. 铁(III)卟啉催化 β -胡萝卜素分解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 312-318
26. 徐瑞云; 孔德俊; 蔡显鄂; 朱京. (*n*-C₁₈H₃₇NH₃)₂MCl₄热容的测定[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 802-807
27. 王光信; 孙浩贤; 侯耀永; 陈宗洪. 均分散胶体的研究 V. 钆化合物均分散颗粒的制备[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 815-818
28. 袁丽霞; 杨郭英; 孙德升; 王遵尧; 池清清. Br₂+Cl₂=2BrCl反应机理的理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1191-1195
29. 宋维平; 傅孝愿; 何绍仁. 氯代酸气相热消除反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 908-915
30. 华南平; 吴遵义; 杜玉扣; 邹志刚; 杨平. Pt、N共掺杂TiO₂在可见光下对三氯乙酸的催化降解作用[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1081-1085
31. 王娟; 张长瑞; 冯坚. 三甲基氯硅烷对纳米多孔二氧化硅薄膜的修饰[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1399-1403
32. 姜太平; 李大纲; 戴厚晨; 唐书环; 徐铁伟; 高鸣. Li_{1.3}Ti_{1.7}Al_{0.3}(PO₄)₃与Na⁺的离子交换[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 782-785
33. 李玲; 邱晓梅; 孙德志; 刘峰; 邸友莹; 尹宝霖. D-甘露醇与D-山梨醇在氯化钠水溶液中的稀释焓[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 215-220
34. 王昌松; 冯新; 陆小华. 十八烷基三氯硅烷表面改性钛酸钾晶须[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 586-590
35. 朱承驻; 张仁熙; 房豪杰; 赵庆祥; 侯惠奇. 355 nm光照下大气液相中HNO₂与C₆H₅Cl的反应机理[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 367-371
36. 杨波; 余刚; 黄俊. Pd修饰Ti电极对水相中2,4,5-PCB还原脱氯的研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 306-311
37. 潘丹霞; 于勇; 董文博; 郑璐; 卢霄; 姚思德; 侯惠奇. CCl₄的光解微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1099-1103
38. 陈人杰; 吴锋. 高氯酸锂-乙酰胺新型二元熔盐电解质的谱学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 177-181
39. 许莉; 金钰; 林瑞森; 胡新根. 氨基酸在氯乙醇水溶液中的体积性质[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 55-59
40. 李小平; 刘志宏; 高世扬; 胡满成; 夏树屏. 硼酸溶液中氯柱硼镁石的溶解及相转化动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 584-587
41. 刘洁翔; 董梅; 秦张峰; 王建国. AIPO₄-5分子筛中二氯苯吸附的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 696-700
42. 陈人杰; 吴锋; 梁宏莹; 毛立彩. 高氯酸锂-乙酰胺/乙烯脲体系的二元熔盐电解质[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 323-326
43. 韩世同; 习海玲; 付贤智; 王绪绪; 丁正新; 林志聪; 苏文悦. 芥子气模拟剂2-氯乙基乙基硫醚的光催化降解[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 296-301
44. 王明涌; 邢海青; 王志; 郭占成. 超重力强化氯碱电解反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 520-526
45. 袁焜; 刘艳芝; 吕玲玲; 马伟超. (CH₃)₂S与HOCl分子间的卤键和氢键相互作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1257-1263
46. 刘敏; 朱兰英; 李斌; 赵强; 孙得志; 林瑞森. *N,N*-二甲基甲酰胺在不同浓度氯化钠水溶液中的稀释过程热力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1307-1320
47. 李学刚; 吴光权; 张明晓; 刘发敏. 混合表面活性剂的表面活性及加溶能力[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 758-761
48. 张邦华; 李春刚; 宋谋道; 周庆业; 郝广杰; 张莹. PVC/PBD-b-PMMA共混体系相容性的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 807-811
49. 吴新明; 刘义; 屈松生; 张大顺; 刘平; 王春艳. 稀土脯氨酸配合物[RE₂(L-Pro)₆(H₂O)₄](ClO₄)₆的标准生成焓测定 [J]. 物理化学学报, 2001,17(10): 956-960
50. 徐四川; 赵新生. 硝酸氯在冰表面上反应的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 988-994
51. 邹建卫; 蒋勇军; 胡桂香; 曾敏; 庄树林; 俞庆森. 多氯联苯的定量结构-性质(活性)关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 267-272
52. 张志颖; 王传义; 刘春艳; 唐芳琼; 陈习意; 岳军. 反胶束对纳米氯化银反应性能的微环境限定[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1061-1067
53. 姜太平; 李大纲; 潘蓉; 张慧萍. Li₂Mg₂Si₄O₁₀F₂·H₂Mn₈O₁₆·1.4H₂O和Li_{1.3}Ti_{1.7}Al_{0.3}(PO₄)₃在高浓度LiCl水溶液中的离子交换行为[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 839-843
54. 翟翠萍; 刘学军; 赵扬; 王键吉. 用核磁共振技术研究[C₄mim][BF₄]在重水和氘代氯仿中的聚集行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1185-1189
55. 施介华; 肖科科; 吕园园. α -氯丙酸乙酯对映体与 β -环糊精的主客体相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1273-1278
56. 李莉; 马禹; 曹艳珍; 计远; 郭伊苻. 有序介孔材料H₆P₂W₁₈O₆₂/TiO₂(Brij-76)的制备与微波增强光催化降解

57. 陈新 李瑛. 二氯乙烯铬烯与甲硫醚环加成的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2229-2235
58. 杨培霞; 安茂忠; 苏彩娜; 王福平. 离子液体中钴的电沉积行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2032-2036
59. 刘艳芝 何丽红 袁焜 吕玲玲 王云普. HOCl...HCOCl复合物的结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1625-1630
60. 黄卡玛; 贾国柱; 杨晓庆. 微波频率下氯化钠溶液电导率的非线性特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 20-24
61. 许兴中; 杨建锋; 李小年; 严新焕. 激光溅射法制备Pt/CNTs催化剂用于邻氯硝基苯的液相加氢反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 121-126
62. 陈人杰; 吴锋; 李丽; 邱新平; 陈实. 高氯酸锂与1,3-氮氧杂环-戊-2-酮形成的二元熔盐电解质[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 554-558
63. 童少平; 马淳安; 费会. 两类不同阳极电氧化过程中的失活现象及氧化机制[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 424-428
64. 张成根; 李文佐; 黄明宝. 溶液中甲醇和二氯亚砷的化学反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 399-403
65. 傅铁祥; 曹军; 汤跃群; 黄道昌; 李和平. 钴(II)与2,2'-联吡啶-1,1'-二氧化物的多核配合物的合成和性质[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 563-566
66. 高胜利; 郭利娟; 张逢星; 马英. ZnCl₂-氨基酸 (Leu/Try/Val/Thr)-H₂O体系的等温溶度 [J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 573-576
67. 范荫恒; 廖世健; 李伟娜; 徐杰; 王复东. 纳米KH颗粒的热稳定性及其化学反应活性 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 55-58
68. 盛六四; 齐飞; 高辉; 张允武; 俞书勤. C₂H₃Cl分子近阈值处真空紫外光离子谱研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 647-649
69. 陈洪龄; 王延儒; 时钧. 单分散超细二氧化钛颗粒的制备及粒径控制[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 713-717
70. 周健; 朱宇; 汪文川; 陆小华; 王延儒; 时钧. 超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 207-212
71. 王岩; 方德彩; 傅孝愿. 硫代双烯酮二聚反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 35-39
72. 侯士峰; 杨可盛; 方惠群; 陈洪渊. 四氯苯醌自组装膜电子传递机制的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 640-644
73. 李强; 李红志; 孔繁敖. 草酰氯和2,3-丁二酮的紫外光解[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 259-264
74. 郑旭煦; 胥江河; 林治华; 谭世语. OH与TCE和PCE加成中间体消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1080-1085
75. 阎江丽; 毛希安; 沈联芳. 核磁共振研究二茂铁铂配合物构象交换热焓[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 853-856
76. 周传佩; 陈文生; 刘义; 李林尉; 屈松生. 氯化镧与甘氨酸配位反应的热化学研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1115-1118
77. 蔡小萍; 方德彩; 傅孝愿. ClONO₂与O(³P)的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 689-693
78. 刘付铁; 李承祥; 高辉; 盛六四; 张允武. 3-氯-1, 2-环氧丙烷的同步辐射光电离[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 758-763
79. 孙远华; 张同来; 张建国; 杨利; 乔小晶. 高氯酸碳酰肼钴、高氯酸碳酰肼镍快速热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 649-652
80. 李建昌; 薛增泉; 张浩; 曾燕; 刘惟敏; 吴全德. 真空沉积TCNQ薄膜的手性分形结构[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 579-582
81. 盛夏; 方堃; 邹纲; 何平笙; 吕卫星. 组份可控的钉螯合物功能单分子膜[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 237-241
82. 李凤仪; 徐文媛; 余军文. 二氯甲基硅烷醇解的量化计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 338-341
83. 刘北平; 谭志诚; 余华光; 兰孝征; 张大顺; 刘平; 孙立贤. 稀土钛丙氨酸配合物的热力学性质[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 445-449
84. 林承志; 蔡小海; 谢有畅. CuCl₂/NaY体系表面分散态研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 523-526
85. 廖建辉; 刘立志; 王国英; 姜炳政. PTHF-b-PMMA/PVC共混体系的相容性和结晶行为[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 657-662
86. 李红志; 王学斌; 孔繁敖; 朱起鹤. O(¹D)+Si(CH₃)₃Cl反应生成振动激发的OH(v≤3)[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 447-449
87. 谢文蕙; 郑子勤; 汤鸣; 李东. 氯苯类化合物在盐水溶液中的活度系数[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 392-397
88. 李卫星; 周洵钧; 蔡国强. α-氯甲硫醚自由基的构型和推拉效应[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 402-405
89. 王寿祥; 邱志新; 陈森; 龚建平. 穿过液膜的自发电势振荡[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 273-276
90. 潘传智; 杨迈之; 蔡生民; 周国定. 氯离子对铜或黄铜表面膜半导体性质的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 99-102
91. 韩恩山; 武昭华; 陈宗洪; 张玉苓; 朱灵芝. 均分散氯化氧铋胶体粒子制备[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 94-98
92. 王玮; 李来明; 席时权. 氯化癸铵的低频拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 18-21

93. 钟发平;杨汉西;徐知三;查全性.微型拉曼电解池现场研究硫酰氯的电化学还原[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 266-269
94. 彭谢兰;谢青季;康青;姚守拙.水合高氯酸盐+有机溶剂体系中氢氧化物电沉积的EQCM研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1361-1366
95. 王沂轩;赵健萍;戴明.极性非质子溶剂与甲醇或1,2-二氯乙烷的汽液平衡[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 636-641
96. 章萍萍;张五昌;张挺芳;周文娟;王志勤.钡(II)配合物和氯化锌在DMF中阴极还原的动力学[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 668-672
97. 李芝芬;荆军平;孙赋;刘瑞麟. ^{35}Cl NMR研究溶液中离子对和离子缔合[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 772-777
98. 龚桦;姜永基;王贻;陈铭之;郑国康.某些Lewis碱与 CCl_4 和 CHCl_3 在298.15K的过量体积[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 49-56
99. 张英珊;赵敏寿;唐定骧.用 NH_4Cl 氯化 Li_2CO_3 的研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 227-230
100. 上官国强;张树功;金钟声;刘淑莹;倪嘉缙. β -羧乙基(或 α -甲基乙基)锆三氯化物晶体和分子结构及其质谱分析[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 223-226
101. 赵炜;李长林.激光引发的氯自由基与1, 2-二氯乙烷的反应研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 358-361
102. 吴进;杜琳;李桂英;梁斌勇;秦松;胡常伟.钛基 RuOx-PdO 电极光电降解活性艳红K-2BP的研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 268-273
103. 黄斯娉 袁中直.双核钴锰酞菁对 SOCl_2 还原反应的电催化性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
104. 王晓梅, 胡吉明, 张鉴清, 曹楚南. IrO_2 电极在氯酚水溶液中的电化学活性[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
105. 王芳, 刘俊华, 殷元骥, 徐贤伦.凹凸棒土负载铂催化剂上对氯硝基苯的高活性高选择性液相加氢反应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
106. 张昌华, 张延, 张嵩, 张冰.氯碘甲烷在A带的光解动力学[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
107. 孙剑秋, 宋崇富, 宁坤, 林少斌, 李全新.微孔晶体材料C12A7- Cl^- 的表面氯负离子发射性能和机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
108. 翁克凤, 王惠钢, 祝新明, 郑旭明.尿嘧啶和5-氯尿嘧啶 $^1\text{S}_0 \rightarrow ^1\text{S}_2$ 跃迁动态结构的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
109. 王晨, 严鹏, 肖进新.烷基硫酸盐和烷基磺酸盐与阳离子聚电解质相互作用的差别[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0