

Br₂+2HI=2HBr+I₂应机理的密度泛函理论

翟志才; 柏云杉; 王遵尧; 王连生

南京大学环境学院, 南京 210093; 盐城工学院化工系, 盐城 224003

摘要:

用密度泛函理论(DFT)B3LYP方法, 取3-21G**基组研究了气相反应Br₂+2HI=2HBr+I₂的机理, 求得一系列四中心和三中心的过渡态. 双分子基元反应Br₂+HI→HBr+IBr和IBr+HI→I₂+HBr的活化能(81.02和121.08 kJ·mol⁻¹)小于Br₂、HI和IBr的解离能(249.21、320.16和232.42 kJ·mol⁻¹), 故从理论上证明了标题反应将优先以分子与分子作用形式分两步完成. 同时发现I原子与Br₂分子反应生成较稳定的IBr₂是一个无能垒过程, IBr₂分解为IBr和Br原子的能垒为70.88 kJ·mol⁻¹.

关键词: 溴 碘化氢 DFT方法 反应机理 双分子反应

收稿日期 2003-10-27 修回日期 2003-12-16 网络版发布日期 2004-04-15

通讯作者: 王遵尧 Email: wangzun315cn@sina.com

本刊中的类似文章

1. 周原; 梅虎; 梁桂兆; 李志良. 取代基物化参数及其在药物定量构效关系中的应用[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 486-491
2. 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
3. 张兆荣; 索继栓; 张小明; 李树本. MCM-41中孔SiO₂分子筛合成新方法[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 243-248
4. 唐宇虹; 刘铨良; 侯印兰. 对氨基苯甲酸BZ反应体系分区振荡行为的研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1031-1034
5. 张雅明; 沃罗布也夫AF; 索洛玛季娜NA; 莫洛科娃LF. 溴化钠在正丙醇-水混合溶剂中溶解热和溶剂化热[J]. 物理化学学报, 1994, 10(10): 903-908
6. 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
7. 王新平; 张嘉云; 唐季安; 江龙. 表面活性剂与聚丙烯酰胺在油水界面的流变性[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 88-92
8. 李雪辉; 张磊; 李琼; 耿卫国; 叶玉嘉; 王乐夫. 1-正丁基-3-甲基咪唑溴化物离子液体TGA-FTIR研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1465-1468
9. 朱必学; 史鸿运; 林智信; 蔡汝秀. 钛与3,5-DBSAF反应的荧光动力学及配合物结构[J]. 物理化学学报, 1997, 13(07): 664-668
10. 王惠; 冉新权; 陈佩珩. CsBr与SmBr₃在氢溴酸介质中反应的相化学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(02): 169-173
11. 李永红; 陈丽萍; 徐文媛; 洪三国. 2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 389-392
12. 唐颖; 姬磊; 唐碧峰; 朱荣淑; 张嵩; 张冰. 溴代烷烃在紫外波段的光解离过程[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 344-349
13. 张锋 曹振洲 覃晓 刘玉柱 王艳梅 张冰. 2-溴噻吩和3-溴噻吩在267 nm的C—Br键解离机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1335-1341
14. 曹振洲 张昌华 王艳梅 张锋 华林强 张冰. 邻溴甲苯在234和267 nm的光解动力学[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 423-429
15. 赵国玺; 肖进新. 十二烷基季铵盐及其与十二烷基硫酸钠混合体系的表面活性[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 785-790
16. 徐桂英; 陈爱民; 刘尚营; 苑世领; 魏西莲. C₁₂NBr对黄原胶/Cr(III)凝胶体系粘弹性的影响[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 1043-1047
17. 刘彦方; 赵敏; 申世刚; 高俊刚. TBBPAER/DDM的固化反应动力学[J]. 物理化学学报, 1998, 14(10): 927-931
18. 王世兵; 宋明芝; 魏西莲; 尹宝霖; 孙得志. 微量热法研究α-环糊精与新型表面活性剂的包结作用[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 837-842

扩展功能

本文信息

PDF(1242KB)

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

▶ 溴

▶ 碘化氢

▶ DFT方法

▶ 反应机理

▶ 双分子反应

本文作者相关文章

▶ 翟志才

▶ 柏云杉

▶ 王遵尧

▶ 王连生

19. 王勇;李浩然;王从敏;许映杰;韩世钧.单重态二溴卡宾和甲醛环加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1339-1344
20. 朱英红,徐颖华,马昊,赵峰鸣,马淳安.水溶液中2,4,6-三溴苯酚在银阴极上的选择性脱卤[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1190-1194
21. 高筱玲;郭彦;田燕妮;赵健伟.表面活性剂与血红蛋白的作用对转移电子数的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1178-1182
22. 秦艳;黄丽;董文博;房豪杰;侯惠奇.355 nm光诱发的水体中 HNO_2 与 $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$ 交叉反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1677-1682
23. 赵文霞;胡满成;李淑妮;蒋育澄;张晓蕾;胡蕾;陈怀军. $\text{RbBr}/\text{CsBr}-\text{CH}_3\text{OH}/\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}-\text{H}_2\text{O}$ 三元体系的溶解度[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 695-700
24. 胡尚林;黄龙;戴乐蓉.正、负离子表面活性剂混合体系溶致液晶生成的相行为[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 692-695
25. 苏文悦;付贤智;魏可镁. SO_4^{2-} 表面修饰对 TiO_2 结构及其光催化性能的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 28-31
26. 刘丹;陈光巨;刘若庄;傅孝愿.2-溴乙酸气相热消除反应的机理探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 872-876
27. 周卫东;盛六四;武国华;高辉;齐飞;张允武.溴乙烷光电离解离的理论计算和实验[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 948-951
28. 张兆荣;索继栓;张小明;李树本.MCM-41分子筛合成与模版剂回收新方法[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 333-337
29. 赵琦;韩秀文;刘秀梅;翟润生;林励吾;包信和;郭新闻;李钢;王祥生.以四丙基溴化铵为模版剂合成TS-1分子筛的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 906-912
30. 谷希斌;王光俊;黄建华;陈茂筠;韩克利;何国钟;楼南泉.266nm激光光解间氟溴苯和对氟溴苯[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1062-1066
31. 张子富;杨家振;杨齐志;杨永珍;刘伟;李辉.混合溶剂中弱电解质解离热力学(I)[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 668-674
32. 白春礼;方晔;曹恩华;张平城;何裕建;唐有祺.三链DNA $d(\text{A})_{10} \cdot 2d(\text{T})_{10}$ -溴乙锭的能量转移[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 295-298
33. 詹明生;周士康;储焰南;宋芳青;杨新;李方琳. $F(^2P)$ 与 CH_2Br_2 反应的化学发光光谱及其动力学[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 274-278
34. 李丽霞;王继扬;袁多荣;秦世英;于慧;郑莹.二溴三烯丙基硫脲合镉单晶的拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 677-680
35. 严鹏权;郭荣;朱霞石;沈明.CTMAB- $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{OH}-\text{H}_2\text{O}$ 体系微乳液、液晶及其增溶特性[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 690-693