

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 论文

### Se-CO-H<sub>2</sub>O体系生成H<sub>2</sub>Se的反应机理研究

李静, 瞿永泉, 韩克利, 陆世维, 何国钟

中国科学院大连化学物理研究所, 分子反应动力学国家重点实验室, 大连 116023

摘要:

采用密度泛函理论中的B3LYP/6-31G\*\*方法研究了在三乙胺存在下, 从Se-CO-H<sub>2</sub>O体系中制备H<sub>2</sub>Se的详细机理. 溶剂效应采用(CPCM)模式, 在相同的方法与基组条件下模拟了该反应. 计算结果表明, 在四氢呋喃溶液中, 反应通过三个能垒(分别是45.4, 8.4和119.9 kJ/mol)的过渡态. 中间产物 [(HOOCSe<sup>-</sup>)·(Base·H<sup>+</sup>)] 的稳定性与产物接近, 可以和HSe的铵盐共存, 而且, 按照理论计算的结果, 这种物质可以作为还原剂.

关键词: 硒化氢; 三乙胺; CPCM; 溶剂效应; 四氢呋喃

### Formation Mechanism of Selane from the Reaction System of Selenium, Carbon Monoxide and Water

LI Jing, QU Yong-Quan, HAN Ke-Li, LU Shi-Wei, HE Guo-Zhong

Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China

Abstract:

A detailed mechanism for the formation of selane(H<sub>2</sub>Se) from Se-CO-H<sub>2</sub>O system in the presence of triethylamine was studied by density functional theory calculations at the B3LYP/6-31G\*\* level. The solvent effect is assessed by the CPCM method at the same level. The calculations suggest that the reaction proceeds through three transition states with energies barriers of 45.4, 8.4 and 19.9 kJ/mol in solvent tetrahydrofuran, respectively. The intermediate compound [(HOOCSe<sup>-</sup>)·(Base·H<sup>+</sup>)] , whose stability is close to that of the product, may coexist with amine salt of hydrogen selenide( [HSe<sup>-</sup>]·[Base·H<sup>+</sup>] ) and works as a reductant according to the results of theoretical calculations.

Keywords:

收稿日期 2005-04-27 修回日期 网络版发布日期 2006-04-10

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20373071)资助

通讯作者: 韩克利(1963年出生), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事分子反应动力学研究. E-mail: klhan@dicp.ac.cn

作者简介:

参考文献:

null

本刊中的类似文章

文章评论

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(259KB)

[HTML全文]

[\({article.html\\_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

硒化氢; 三乙胺; CPCM; 溶剂效应; 四氢呋喃

本文作者相关文章

孙道兴

夏树伟

夏少武

PubMed

Article by Sun, D. X.

Article by Jia, S. W.

Article by Jia, S. W.

反  
馈  
人

邮箱地址

反  
馈  
标  
题

验证码

8667