

环己烷的热裂解机理

翟高红; 王惠; 杨海峰; 冉新权; 王育彬; 文振翼

西北大学化学系; 西北大学现代物理研究所, 西安 710069

摘要:

用Gaussian 98程序包中AM1法和DFT方法, 对液相沉积法制碳/碳(C/C)复合材料的碳源化合物环己烷的热裂解机理做了量子化学理论研究. 通过对化合物6种可能的热裂解路径的热力学和动力学计算, 找到了环己烷热裂解的主反应路径. 结果表明: (1) AM1与DFT计算均显示, 断裂C—C键, 最终生成乙烯和2-丁烯的反应通道是环己烷的主要裂解通道, 与质谱数据吻合; (2) 除主反应路径外, 余下的由易到难生成化合物的顺序为甲基环戊烷 > 环己烯 > 4-甲基环戊烯 > 1, 3-丁二烯; (3) AM1方法可以很好地推测较大分子体系的热裂解机理, 而DFT方法计算的热力学量更接近实验数据.

关键词: C/C复合材料 碳源化合物 环己烷 热裂解机理 量子化学研究

收稿日期 2000-10-21 修回日期 2000-12-18 网络版发布日期 2001-04-15

通讯作者: 王惠 Email: xb@pub.xaonline.com

本刊中的类似文章

1. 李志; 巩前明; 梁吉; 黄启忠; 黄伯云. 新型ACNT/C纳米复合材料氧化性能的初步研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 316-321

扩展功能

本文信息

PDF(1560KB)

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

▶ C/C复合材料

▶ 碳源化合物

▶ 环己烷

▶ 热裂解机理

▶ 量子化学研究

本文作者相关文章

▶ 翟高红

▶ 王惠

▶ 杨海峰

▶ 冉新权

▶ 王育彬

▶ 文振翼