III-P-1.18

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT CƠ CHẾ PHẢN ỨNG OZONE VỚI CÁC HYDROCARBON NHẸ

Phùng Quán, Mai Văn Thanh Tâm, Trang Mộc Khung, Vũ Năng An, Phạm Trần Nguyên Nguyên, Bùi Thọ Thanh
Khoa Hóa học, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp.HCM

Tóm tắt

Dùng các phương pháp tính toán như lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) và ab-initio xây dựng bề mặt thế năng của các sản phẩm ozone với các hydrocacbon nhẹ (khí đốt), được biết như những phản ứng quan trọng trong hóa học khí quyển. Các tác chất, trạng thái chuyển tiếp, chất trung gian và các sản phẩm được tối ưu hóa hình học bằng phương pháp DFT và phương pháp MP2 với bốn bộ hàm cơ sở 6-31G (d), 6-31++G(d, p), 6-31++G (d, p), 6-311++G (2d, 2p) và 6-311++G (2df, 2p) được dùng để khảo sát 2 hướng phản ứng có thể có của ozone với hydrocarbon nhẹ: phản ứng khử (dehydrogen hóa) thông qua sự hình thành gốc hydrotrioxyl (HTR) và phản ứng thế (oxi hóa) thông qua sự hình thành hydrodioxyl. Các tính chất nhiệt động ΔH^o, ΔS^o và ΔG^o cũng được tính cho các phản ứng này. Tính chất phổ dao động được tính cho tác chất, sản phẩm, và các trạng thái chuyển tiếp với phương pháp HF/6-311++G (2d,2p).

A THEORETICAL STUDY ON THE MECHANISM OF OZONE REACTION WITH LIGHT HYDROCARBONS

Phung Quan, Mai Van Thanh Tam, Trang Moc Khung, Vu Nang An, Pham tran Nguyen Nguyen, Bui Tho Thanh
Faculty of Chemistry, University of Science - VNU HCMC

Abstract

Density Functional Theory (DFT) and ab-initio calculations of the potential energy surface of ozone with light hydrocarbons (petroleum gas) have been performed which is known to be important in atmospheric chemistry. Reactants, transition states, intermediate species and products are optimized at DFT (B3LYP) and MP2 level of theory using four basis sets 6-31G(d), 6-31++G(d,p), 6-311++G(d,p), 6-311++G(2d,2p) and 6-311++G(2df,2p) for the two possible reaction paths, namely, abstraction reaction through formation of hydrotrioxyl radical (HTR), replacement reaction through formation of hydrodioxyl radical (HDR). Thermodynamic properties ΔH^o, ΔS^o, and ΔG^o have been calculated for these reactions. Harmonic vibrational frequencies have been calculated for reactants, products, and transition states up to HF/6-311++G(2d,2p) level of theory.