乙二醇作为产物的反应表

说明：  
 Gibbs自由能判据: ‘1’代表从热力学角度利于反应正向进行；‘-1’代表从热力学角度不利于反应正向进行。  
 前线轨道理论判据: ‘1’代表基于前线轨道理论利于反应正向进行；‘-1’代表基于前线轨道理论不利于反应正向进行。  
 是否同时满足: ‘1’代表同时满足Gibbs和前线轨道理论判据，利于反应正向进行；‘-1’代表不同时满足上述两判据。  
 数据来源：所有原始属性数据计算方法均为 B3LYP/6-31G(2df,p)，单位均为eV。

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 反应物A | 反应物B | 产物C | Gibbs自由能判据(ΔG) | 前线轨道理论判据 | 是否同时满足 |
| G: -2079.55804 HOMO: -7.96749 LOMO: 1.86942 factor:2 | G: -2104.18652 HOMO: -7.74164 LOMO: 1.37690 factor:1 | G: -6264.36569 HOMO: -7.05863 LOMO: 1.58914 factor:1 | 1 (-1.06309) | -1 | -1 |
| G: -2079.55804 HOMO: -7.96749 LOMO: 1.86942 factor:1 | G: -4185.45180 HOMO: -6.91169 LOMO: -0.53879 factor:1 | G: -6264.36569 HOMO: -7.05863 LOMO: 1.58914 factor:1 | -1 (0.64415) | -1 | -1 |
| G: -2079.55804 HOMO: -7.96749 LOMO: 1.86942 factor:1 | G: -4184.20345 HOMO: -7.29809 LOMO: 2.83543 factor:1 | G: -6264.36569 HOMO: -7.05863 LOMO: 1.58914 factor:1 | 1 (-0.60420) | -1 | -1 |
| G: -3115.84705 HOMO: -7.26544 LOMO: -1.10478 factor:1 | G: -3148.40841 HOMO: -7.21918 LOMO: 2.13337 factor:1 | G: -6264.36569 HOMO: -7.05863 LOMO: 1.58914 factor:1 | 1 (-0.11023) | -1 | -1 |