

CF₃O₂自由基和NO反应机理的理论研究

郑妍; 查东; 李来才

四川师范大学化学与材料科学学院, 成都 610066

摘要:

用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法, 分别在6-31G、6-311G、6-311+G(d)基组水平上研究了CF₃O₂自由基和NO反应机理. 研究结果表明, CF₃O₂自由基和NO反应存在三条可行的反应通道, 优化得到了相应的中间体和过渡态. 从活化能看, 通道CH₃O₂+NO→IM1→TS1→IM2→TS2→CF₃O+ONO的活化能最低, 仅为70.86 kJ•mol⁻¹, 是主要反应通道, 主要产物是CF₃O和NO₂. 而通道CH₃O₂+NO→IM1→TS3→CF₃ONO₂和CH₃O₂+NO→TS4→IM3→TS5→IM4→TS6→CF₃O+NOO的活化能较高, 故该反应难以进行.

关键词: 反应通道 过渡态 活化能 CF₃O₂自由基

收稿日期 2005-07-13 修回日期 2005-09-19 网络版发布日期 2006-01-22

通讯作者: 李来才 Email: lilcmail@163.com

本刊中的类似文章

1. 孙琦;顾月姝;郭敬忠;印永嘉;李学初;沈关林. 单次碰撞条件下Ar(³P_{0,2})与SO₂, SOCl₂的传能反应[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 31-37
2. 李来才;田安民. CH₃(²A')自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 626-629
3. 李来才;朱元强;查东;田安民. CH₃CF₂O₂与HO₂自由基反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 490-493
4. 刘海峰;闫华;刘志勇;王少龙. 三氟化氯和水反应的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1099-1104
5. 王惠;刘建勋;王宝山;孔繁敖. C₂H₃自由基与O₂反应的红外发射光谱及反应通道[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 674-676
6. 苏红梅;吴成印;杨继新;钟晋贤;孔繁敖. CH₂(X³B₁)自由基与N₂O反应的研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 560-563

扩展功能

本文信息

PDF(671KB)

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

▶ 反应通道

▶ 过渡态

▶ 活化能

▶ CF₃O₂自由基

本文作者相关文章

▶ 郑妍

▶ 查东

▶ 李来才