

引用信息: MO Li-Xin; ZENG Yan-Li; ZHENG Shi-Jun; MENG Ling-Peng. Acta Phys. -Chim. Sin., 2006, 22(06): 706-711 [默丽欣; 曾艳丽; 郑世钧; 孟令鹏. 物理化学学报, 2006, 22(06): 706-711]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

BH₂⁺与H₂O反应机理的量子拓扑研究

默丽欣; 曾艳丽; 郑世钧; 孟令鹏

河北师范大学计算量子化学研究所, 石家庄 050016

摘要:

采用密度泛函方法B3LYP/6-311+G(d, p)和耦合簇方法CCSD/6-311+G(d, p)研究了BH₂⁺与H₂O的气相离子-分子反应机理. 优化得到了反应途径中各驻点的几何构型, 并采用内禀反应坐标法进行追踪. 从量子拓扑学的角度, 讨论了在反应过程中各化学键的变化. 反应(I)经历了一个四元环过渡态, 找到了这个反应的能量过渡态和两个结构过渡态.

关键词: 硼氢正离子 离子-分子反应 结构过渡态 能量过渡态 电子密度拓扑分析

收稿日期 2005-12-26 修回日期 2006-02-22 网络版发布日期 2006-05-31

通讯作者: 孟令鹏 Email: menglp@mail.hebtu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(744KB)

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

▶ 硼氢正离子
▶ 离子-分子反应
▶ 结构过渡态
▶ 能量过渡态
▶ 电子密度拓扑分析

本文作者相关文章

▶ 默丽欣
▶ 曾艳丽
▶ 郑世钧
▶ 孟令鹏