

引用信息: ZHOU Jun-Hong; ZENG Yan-Li; ZHANG Xue-Ying; MENG Ling-Peng; ZHENG Shi-Jun. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(08): 1229-1234 [周俊红;曾艳丽;张雪英;孟令鹏;郑世钧. 物理化学学报, 2007, 23(08): 1229-1234]

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

IClO₂异构化反应机理及电子密度拓扑研究

周俊红; 曾艳丽; 张雪英; 孟令鹏; 郑世钧

河北师范大学化学与材料科学学院, 计算量子化学研究所, 石家庄 050016; 华东理工大学化学与分子工程学院, 上海 200237

摘要:

利用密度泛函理论方法研究了IClO₂异构化反应机理. 优化得到了七种异构体, 其中OIClO和IClOO还未见报道, 对各异构体的热力学稳定性进行了比较. 找到了异构化过程的过渡态, 并通过内禀反应坐标(IRC)计算确认了各个异构体之间的相互转化关系. 从量子拓扑学的角度, 对典型异构化反应通道IRC途径上的各点进行了电子密度拓扑分析, 讨论了反应过程中化学键的断裂、生成以及化学键的变化规律, 找到了反应途径上的能量过渡态(ETS)和结构过渡态(STS).

关键词: IClO₂ 异构化 能量过渡态 结构过渡态

收稿日期 2007-01-24 修回日期 2007-04-28 网络版发布日期 2007-06-14

通讯作者: 郑世钧 Email: sjzheng@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(1031KB)

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

▶ IClO₂
▶ 异构化
▶ 能量过渡态
▶ 结构过渡态

本文作者相关文章

▶ 周俊红
▶ 曾艳丽
▶ 张雪英
▶ 孟令鹏
▶ 郑世钧