

研究论文

气相中Ir+循环催化N₂O与CO反应机理的理论研究

王永成* 张庆莉 耿志远 李会珍 王清云 司玉冰

(西北师范大学化学化工学院 甘肃省高分子材料重点实验室 兰州 730070)

收稿日期 2008-4-15 修回日期 2008-6-25 网络版发布日期 2008-12-28 接受日期 2008-8-18

摘要

采用密度泛函UB3LYP方法和Stuttgart赝势基组, 计算研究了气相中循环催化N₂O + CO → N₂ + CO₂ 反应的微观机理. 通过对相关物种亲氧性的计算, 证明了Ir+循环催化作用在热力学上是可行的. 不同自旋态反应势能面的计算结果表明, 循环催化的两步反应均为自旋禁阻反应, 各存在不同自旋态势能面的交叉, 并运用Yoshizawa的内禀坐标单点垂直激发计算的方法找出了势能面交叉点; 两步反应均为放热反应, 总放热量为358.9 kJ·mol⁻¹.

关键词

[Ir+循环催化](#) [密度泛函理论](#) [自旋禁阻反应](#) [势能面交叉点](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王永成 wangyc@nwnu.edu.cn

作者个人主页:

王永成* 张庆莉 耿志远 李会珍 王清云 司玉冰

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (386KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[Ir+循环催化” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王永成,张庆莉,耿志远,李会珍,王清云,司玉冰](#)