山东大学学报(理学版) 2007, 42(5) 44-49 DOI: ISSN: 1671-9352 CN: 37-1389/N

论文

理论研究OCS与CN自由基的反应机理

孙廷利，刘成卜*
山东大学化学与化工学院， 山东济南250100

摘要：

氧硫化碳(OCS)是大气中含量丰富的含硫气体，也是唯一一种能通过扩散进入平流层的含硫物种. 采用高水平分子轨道理论方法研究了OCS与CN自由基在2A′势能面上的反应机理. 在B3LYP/6-31G(2df)水平下优化了反应物、中间体、过渡态及产物的构型参数，并进行了振动频率分析. 单点能计算采用QCISD(T)/-311+G(3df)理论水平. 在QCISD(T)/6-311+G(3df)//B3LYP/6-31G(2df)水平下构筑了反应的势能剖面. 计算结果表明：在通常的大气条件下，NCS和CO是主要反应产物. 然而，随着温度的升高，生成CNS和CO的反应通道可能变成竞争反应通道.

关键词： 氧硫化碳 CN自由基 反应机理 势能剖面

Theoretical study on the mechanism for the reaction of OCS and CN redicals

SUN Ting-li and LIU Cheng-bu*
School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, Shandong, China

Abstract:

Carbonyl sulfide (OCS) is known to be an important atmospheric species The microcosmic mechanism for the reaction of OCS with CN radicals is studied by using high level molecular orbital theory Geometries of the reactants, intermediates, transition states, and products are optimized at the B3LYP level with the 6-31G(2df) basis set The single-point energy calculations are carried out at the QCISD (T)/6-311+G(3df) level The profile of the potential energy surface is constructed The result shows that the NCS and CO product channel dominates this reaction under general atmospheric conditions. However, the forming of CNS and CO products may become a competitive channel with a temperature increase, especially at the combustion process of sulfur-containing systems.

Keywords: OCS CN radicals reaction mechanism profile of potential energy surface

收稿日期 2007-01-16 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期 2006-10-24

DOI:

基金项目:

通讯作者: 刘成卜

作者简介:

本刊中的类似文章

扩展功能
本文信息
Supporting info
PDF(241KB)
[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
文章反馈
浏览反馈信息
本文关键词相关文章
氧硫化碳
CN自由基
反应机理
势能剖面
本文作者相关文章
孙廷利
刘成卜*