

单分子分解成两个自由基反应的半经典统计方法I.关于CH₄分解成CH₃.和H.自由基的研究

丁世良,邓从豪,王泽新

山东大学理论化学研究室;青岛化工学院化工系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文计算了温度范围在300-1500K, CH₄→CH₃.+H.的分角反应中, 过渡态CH₃...H的平均键长、频率因子、活化能及反应速率常数, 计算结果和实验结果符合得很好。

关键词 [甲基](#) [氢](#) [甲烷](#) [自由基反应](#) [活化能](#) [分解反应](#) [反应速度常数](#) [半经典计算](#) [单分子反应](#)

分类号 [0641](#)

Method of the semiclassical statistics for unimolecular reactions to form two radicals I. decomposition of CH₄ to CH₃. and H.

DIN SHILIAN, DENG CONGHAO, WANG ZEXIN

Abstract In the temperature range of 300-1500 K, the average values of the crit. bond lengths of transition states, the frequency factors, the activation energies, and the rate constants for the chem. reaction CH₄ → CH₃. + H. was studied.

Key words [METHYL GROUP](#) [HYDROGEN](#) [METHANE](#) [FREE RADICAL REACTION](#) [ACTIVATION ENERGY](#) [DECOMPOSITION REACTION](#) [REACTION RATE CONSTANT](#) [SEMICLASSICAL CALCULATION](#) [UNIMOLECULAR REACTION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(185KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“甲基”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [丁世良](#)
- [邓从豪](#)
- [王泽新](#)