

CH(Σ^4^-)+H₂O→CH₂(Σ^3B_1)+OH的直接动态学研究

马思渝,刘若庄

北京师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用从头算方法计算了反应CH(Σ^4^-)+H₂O→CH₂(Σ^3B_1)+OH的反应途径。在此基础上,计算沿反应途径的动态学性质和正则变分过渡态理论的速率常数,并进行隧道效应校正。结果表明,电子相关能对反应活化位垒影响较大;反应存在返回效应和隧道效应,用正则变分过渡态方法和小曲率近似的隧道校正是有效的。

关键词 [从头算法](#) [反应速度常数](#) [过渡态理论](#) [亚稳态](#) [次甲基](#)

分类号 [0641](#)

Studies on the direct dynamics of the reaction CH(Σ^4^-)+H₂O→CH₂(Σ^3B_1)+OH

MA SIYU,LIU RUOZHUANG

Abstract The reaction path of the reaction CH(Σ^4^-)+H₂O→CH₂(Σ^3B_1)+OH is traced with Fukui's theory of intrinsic reaction coordinate by using ab initio MO method with gradient technique. On the basis, the dynamical properties along the reaction path and CVT (canonical variational theory) rate constants with correction of tunneling effect are investigated by reaction path Hamiltonian theory and variational transition state theory. The results show that the effects of electron correlation energy to the activation barrier are notable, the recrossing and tunneling effects exist and the corrections by means of CVT method and small curvature approximation method respectively are efficient.

Key words [AB INITIO CALCULATION](#) [REACTION RATE CONSTANT](#) [TRANSITION STATE THEORY](#) [METASTABLE STATES](#) [METHENYL-](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(427KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“从头算法”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [马思渝](#)
- [刘若庄](#)