

CH₃CF₂O₂与HO₂自由基反应机理的理论研究

李来才; 朱元强; 查东; 田安民

四川师范大学化学学院, 成都 610066; 四川大学化学学院, 成都 610064

摘要:

用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法, 在6-311G、6-311+G(d)、6-311++G(d, p) 基组水平上研究了CH₃CF₂O₂与HO₂自由基反应机理. 结果表明, CH₃CF₂O₂与HO₂自由基反应存在两条可行的通道. 通道CH₃CF₂O₂+HO₂→IM1→TS1→CH₃CF₂OOH+O₂的活化能为77.21 kJ·mol⁻¹, 活化能较低, 为主要反应通道, 其产物是O₂和CH₃CF₂OOH. 这与实验结果是一致的; 而通道CH₃CF₂O₂+HO₂→IM2→TS2→IM3→TS3→IM4+IM5→IM4+TS4→IM4+OH+O₂→TS5+OH+O₂→CH₃+CF₂O+OH+O₂→CH₃OH+CF₂O+O₂的控制步骤活化能为93.42 kJ·mol⁻¹, 其产物是CH₃OH、CF₂O和O₂. 结果表明这条通道也能发生, 这与前人的实验结果一致.

关键词: 反应通道 过渡态 活化能 CH₃CF₂O₂

收稿日期 2004-09-22 修回日期 2004-11-29 网络版发布日期 2005-05-15

通讯作者: 李来才 Email: liline33@sohu.com

本刊中的类似文章

1. 孙琦; 顾月姝; 郭敬忠; 印永嘉; 李学初; 沈关林. 单次碰撞条件下Ar(³P_{0,2})与SO₂, SOCl₂的传能反应[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 31-37
2. 郑妍; 查东; 李来才. CF₃O₂自由基和NO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 156-160
3. 李来才; 田安民. CH₃(²A')自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 626-629
4. 刘海峰; 闫华; 刘志勇; 王少龙. 三氟化氯和水反应的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 1099-1104
5. 王惠; 刘建勋; 王宝山; 孔繁敖. C₂H₃自由基与O₂反应的红外发射光谱及反应通道[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 674-676
6. 苏红梅; 吴成印; 杨继新; 钟晋贤; 孔繁敖. CH₂(X³B₁)自由基与N₂O反应的研究[J]. 物理化学学报, 1999, 15(06): 560-563

扩展功能

本文信息

PDF(1235KB)

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

▶ 反应通道

▶ 过渡态

▶ 活化能

▶ CH₃CF₂O₂

本文作者相关文章

▶ 李来才

▶ 朱元强

▶ 查东

▶ 田安民