

研究论文

F+NCO反应的机理和动力学

侯华; 王宝山; 顾月姝

山东大学化学系, 济南 250100

摘要:

关键词: 从头算 势能面 加成-消除 速率常数 NF自由基

收稿日期 1999-10-26 修回日期 2000-01-13 网络版发布日期 2000-06-15

通讯作者: 顾月姝 Email: guojz@icm.sdu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 汪志祥, 刘若庄, 黄明宝. NCl自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 105-108
2. 冀永强; 冯文林; 郝茂荣; 李会英. CH₃NO₂和CH₃自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 721-726
3. 吕鑫; 徐昕; 王南钦; 廖孟生; 张乾二. CO在Cu/ZnO上吸附的簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(11): 1005-1009
4. 郭建新; 王彦妮; 张启元. 氰基苯阴离子与CO₂间的内球电子转移[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 193-197
5. 赵文娜; 邹建卫; 商志才; 郭明; 俞庆森. 结合三维静电势参数研究二取代苯的定量结构-疏水性关系 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 600-603
6. 郑康成; 饶火瑜; 何峰; 许值涛; 刘汉钦. Fe、Co、Ni双齿巯基配合物从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 299-304
7. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪. 硅烯与乙烯环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 332-336
8. 陈界豪; 王艳; 冯文林. 丙酮酸和苯甲酰甲酸热分解反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 1999, 15(05): 431-435
9. 李光平, 张华北, 田安民, 鄢国森. AlC_n及AlC_n⁺ (n=1-4)原子簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 211-217
10. 张绍文; 傅孝愿. HNCO热解为CO₂和HNCNH的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1004-1008
11. 陈宝吉; 陈德展; 刘奉岭; 宁世光. 合成环氧乙烷新途径的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 591-596
12. 张敬来; 曹泽星; 顾健德; 田安民; 鄢国森. Si₂分子基态和低激发态的电子结构[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 396-398
13. 许小红; 武海顺; 张聪杰; 周伟良. B₂Be₂簇的结构与成键性质的研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(12): 1065-1071
14. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 周伟良. 金属硼化物结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 258-263
15. 汪志祥; 刘若庄; 黄明宝. CH自由基与O₂反应得从头算研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 385-388
16. 王罗新, 易长海, 邹汉涛, 许杰, 徐卫林. 椅式(8,8)单壁碳纳米管内偶氮苯的顺反异构化[J]. 物理化学学报, 2010, 26(01): 149-154
17. 张嵩; 朱荣淑; 王艳梅; 张冰. 对二甲苯分子和离子态振动光谱的理论计算 [J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 553-556
18. 李来才; 钱一鸣; 朱元强; 田安民. CH₃+HNCO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 228-232
19. 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
20. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪. 二氯卡宾与甲醛环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(09): 784-788
21. 糜骏; 冯文林; 李会英; 刘坤辉; 蒲敏. H+CH₂CO反应机理的G2计算[J]. 物理化学学报, 2004, 20(05): 483-487
22. 邹建卫; 蒋勇军; 胡桂香; 曾敏; 庄树林; 俞庆森. 多氯联苯的定量结构-性质(活性)关系[J]. 物理化学学报,

扩展功能

本文信息

PDF(1574KB)

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

▶ 从头算

▶ 势能面

▶ 加成-消除

▶ 速率常数

▶ NF自由基

本文作者相关文章

▶ 侯华

▶ 王宝山

▶ 顾月姝

- 2005,21(03): 267-272
23. 邹建卫;俞庆森;朱龙观.2(1H)-吡啶酮互变异构体系取代效应的理论计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1040-1042
24. 丁涪江;张良辅;苏克和.HNNH₃ 的从头计算研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(11): 1006-1010
25. 周立新;田安民;鄢国森.1,2-二硒-3, 4-二硫方酸的从头计算[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 684-687
26. 庞先勇;冯文林;王艳;张绍文.CH₃ 与NO在单、三态势能面上的反应机理[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 391-395
27. 苏克和;文振翼;胡小玲;李秀仪;王育彬.NH⁰⁻¹⁺₂₋₃ 离解能等的高级*ab initio*计算与评价[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 385-390
28. 杨志忠 刘永军.精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H₂O)₁₁ 9种低能结构的计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 928-934
29. 王洪涛;韩奎;李艳.[Li...X]e^{-[1]}(X=FH, OH₂, NH₃)的光电性质从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1468-1472
30. 延辉;苑世领;刘成卜.烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 8-12
31. 阚蓉蓉;刘洪梅;叶原丰;李鹏;尹星;赵健伟.外电场作用下寡聚苯分子导线的性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 671-675
32. 许旋;徐志广;罗一帆.紫杉醇的核磁共振谱及其分子几何构型的从头算研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 420-425
33. 胡海泉.硝基氢异构化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 544-547
34. 谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山.硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 307-314
35. 杨娥;周立新;章永凡.β-D-核糖 (RI) 与一价、二价金属离子相互作用的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 253-259
36. 夏树伟;隋卫平;陈国华;夏少武.羧甲基壳聚糖衍生物及其振动光谱的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 248-252
37. 刘建军;封继康;付伟;任爱民;刘桂霞.¹CH₂ + N₂O反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 586-593
38. 周立新;黄尊行;田安民;吴立明;胡建明;李俊钱.C₄S^{m-}₄ 相对稳定性的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 752-756
39. 张燕军;李宗和;曹晓燕.HCN和氯反应动力学及产物振动态分布的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 10-14
40. 薛英;谢代前;鄢国森.氟磺酸氟振动光谱的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 138-142
41. 王义贵;孙昌俊;蔡政亭;邓从豪.碱金属烯醇盐的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 116-120
42. 曹晓燕;吴伟;王东;葛茂发;王殿勋.1,2,5-噻二唑衍生物电子结构的紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 491-495
43. 陈波珍;黄明宝;苏红梅;孔繁敖.CH₂ + O₂ 反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 869-872
44. 杨明理;孙泽民;鄢国森.聚脲分子的非线性光学极化率[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 693-697
45. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦.草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 204-209
46. 石土金;刘力;杨达林;朱起鹤.1,4-二氧六环和氨分子氢键团簇的从头算[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 416-421
47. 苏克和;魏俊;胡小玲;岳红;吕玲;王育彬;文振翼.优化几何构型对高级别从头算能量的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 718-723
48. 武海顺;许小红;张聪杰.锥形硼烷B₅H₁₀X的结构和成键性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 627-631
49. 张冬菊;胡海泉;刘永军;步宇翔;刘成卜.Co(H₂O)₆²⁺/3+ 体系电子转移反应动力学的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 855-859
50. 雷鸣;冯文林;徐振峰.羟基钴催化氢甲酰化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 522-526
51. 刘丹;陈光巨;刘若庄;傅孝愿.2-溴乙酸气相热消除反应的机理探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 872-876
52. 邝平先;陈波珍;黄明宝.C(³P)与H₂S反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 389-392
53. 李淑瑾;曹阳;冯建文;施卫平;周伟群.聚吡咯、聚甲基吡咯电子能带结构的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 890-894
54. 孟令鹏;郑世钧;蔡新华.氧原子与二硫化碳反应的机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 990-996

55. 周立新; 莽朝永; 章永凡. 1,2-二硫方酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 15-21
56. 石土金; 李宗和; 刘若庄. $\text{HNCO} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{NCO}$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 247-252
57. 何丽针; 陈光巨; 刘若庄. 丙烯热反应生成甲基环戊烷的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 308-312
58. 谷希斌; 王光俊; 黄建华; 陈茂笃; 韩克利; 何国钟; 楼南泉. 266nm激光光解间氟溴苯和对氟溴苯[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1062-1066
59. 李会英; 冯文林; 冀永强; 徐振峰; 雷鸣. $\text{CH}_2\text{O} + \text{O}[^3P] \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$ 反应途径和变分速率常数 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 446-450
60. 郭明; 邹建卫; 赵文娜; 商志才; 俞庆森. 基于三维静电势参数研究 C_{60} 溶解性的构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 432-435
61. 卢秀慧; 刘成卜; 邓从豪. 二氟硅烯与甲醛环加成反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 78-81
62. 胡海泉; 刘成卜. 双自由基 CF_2 与 O_3 的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1104-1107
63. 张树东; 朱湘君; 王艳; 孔祥和. 甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
64. 刘若庄; 马思渝; 李宗和. CH 与 H_2 分子反应动力学及选态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
65. 王洪涛; 李艳; 韩奎; 郑植仁; 王炳强; 李志儒. $\text{X} \cdots \text{H}_2\text{O}$ ($\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$) 非线性光学性质的从头算理论[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1423-1426
66. 丁涪江; 张良辅; 李广年. 半正交化基近似计算的改进[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 307-312
67. 徐晓芳, 高放, 李红茹, 张胜涛. 生色团连接的苯骈三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 131-140
68. 郭慈, 刘翠, 杨志志. 鸟嘌呤四链体中 Na^+ 的移动[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
69. 王罗新, 许杰, 邹汉涛, 易长海. 硝基甲烷受限于单壁碳纳米管内的热解反应: 手性和尺寸的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
70. 王永霞, 段雪梅, 王钦, 刘靖尧. 甲硫醇和氢原子反应的从头算直接动力学[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 183-187