

研究简报

CH₂O + O[³P] → CHO + OH 反应途径和变分速率常数

李会英; 冯文林; 冀永强; 徐振峰; 雷鸣

北京化工大学应用化学系, 北京 100029

摘要:

采用QCISD/6-311G[d,p]从头算方法, 优化了吸氢反应CH₂O + O[3P] → CHO + OH的反应物、过渡态和产物的几何结构, 并用QCISD(t,full)/6-311G //QCISD/6-311G方法对各驻点进行了单点校正, 得出正逆反应的活化位垒分别为38.86 kJ·mol⁻¹和67.23 kJ·mol⁻¹. IRC (内禀反应坐标) 分析指出, 该反应是一个C-H键断裂和H-O键生成协同进行的反应, 而且在反应途径上存在一个引导反应进行的振动模式, 其引导反应进行s区间为-0.4~0.75 (amu)^{1/2}. 在1300~2270 K温度范围内运用改进的变分过渡态理论 (ICVT), 计算了反应速率常数, 与实验结果相当一致.

关键词: 甲醛 三线态氧 速率常数 从头算法 变分过渡态理论

收稿日期 2001-10-09 修回日期 2001-12-05 网络版发布日期 2002-05-15

通讯作者: 冯文林 Email: wlfeng@buct.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 贺庆林, 胡长文, 张云峰, 张继余, 王恩波, 王凤芝, 赵永志. 柱撑阴离子粘土的合成、表征及催化性能研究(V) [J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 368-371
2. 张玉红; 熊国兴; 杨维慎; 傅贤智. 溶胶-凝胶法制备复合M_xO_y-TiO₂光催化剂[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 273-277
3. 杨建军; 李东旭; 李庆霖; 张治军; 汪汉卿. 甲醛光催化氧化的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 278-281
4. 盛春; 周诗瑶; 李和兴; 邓景发. Ni-P/SiO₂ 催化剂晶化过程及其加氢活性研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(02): 164-168
5. 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
6. 魏赛珍; 毛祖遂; 汪雷; 陈晓峰; 郑永铭. Pd沉积在聚乙烯醇缩甲醛衬底上分形结构研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 218-223
7. 胡吉明; 张鉴清; 张金涛; 曹楚南. IrO₂ 电极在含有机小分子水溶液中的电化学活性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(07): 740-744
8. 李庆水, 林玉琴, 廖远琰. 甲醇催化脱氢反应的研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(05): 442-446
9. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁继青; 刘雪松; 杨培芳; 杨飞勇; 罗孟飞. 甲醛在CeO₂(111)表面吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 2025-2031
10. 刘艳芝 何丽红 袁焜 吕玲玲 王云普. HOCl...HCOCl复合物的结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2008, 24(09): 1625-1630
11. 赵萌; 王金兴; 冯彩慧; 邹博; 陈骋; 王竹仪; 吴凤清; 邹乐辉. TiO₂/Ag₂O纳米材料的制备及其对甲醛的气敏性能[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 1003-1006
12. 张静; 吕福功; 徐勇; 杨学锋; 朱爱民. 介质阻挡放电脱除甲醛的化学动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1425-1431
13. 薛蒙伟; 张征林; 范以宁; 陈懿. Co-Ce-O超细微粒催化剂的结构与催化性能[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 1028-1034
14. 刘海波; 侯占佳; 刘丽英; 徐志凌; 徐雷; 王文澄; 李富铭; 叶明新. 三聚氰胺甲醛树脂的光学性质[J]. 物理化学学报, 2000, 16(06): 563-567
15. 杨辉; 陆天虹; 薛宽宏; 周益明; 孙世刚; 陈声培. 循环伏安和现场FTIR反射光谱研究甲醛在金电极上的氧化[J]. 物理化学学报, 1996, 12(06): 527-531

扩展功能

本文信息

PDF(1346KB)

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

▶ 甲醛

▶ 三线态氧

▶ 速率常数

▶ 从头算法

▶ 变分过渡态理论

本文作者相关文章

▶ 李会英

▶ 冯文林

▶ 冀永强

▶ 徐振峰

▶ 雷鸣