

研究论文

## 烯丙基自由基( $\cdot\text{C}_3\text{H}_5$ )与一氧化氮(NO)反应势能面的理论研究

张浩, 孙延波, 李泽生, 孙家锺

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

收稿日期 2006-3-2 修回日期 网络版发布日期 2006-12-4 接受日期

**摘要** 在CCSD(T)/6-311G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p)+ZPE水平上对反应 $\cdot\text{CHCHCH}_3+\text{NO}$ 进行了计算, 并建立了其单重态的反应势能面. 在该反应中, 分别找到生成P1( $\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HCN}$ ), P2( $\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HNC}$ ), P3( $\text{CH}_3\text{CN}+\text{HCHO}$ ), P4( $\text{CH}_3\text{CCH}+\text{HNO}$ )的4条产物通道, 其中 $\cdot\text{CHCHCH}_3$ 和NO中的氮原子直接连接形成m1(*trans*- $\text{CH}_3\text{CHCHNO}$ ), m1经过顺反异构形成m2(*cis*- $\text{CH}_3\text{CHCHNO}$ ), m2再经过CCNO四元环合, 然后发生环解离, 最后生成产物P1( $\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HCN}$ )是最可行的产物通道, 其余三条通道为次要产物通道. 该体系中生成P1的反应路径与同类体系 $\cdot\text{C}_2\text{H}_3+\text{NO}$ 的主要反应路径相类似, 两者的差别是前者为动力学可行的反应, 而后者为动力学不可行反应, 这使得 $\cdot\text{CHCHCH}_3+\text{NO}$ 反应比 $\cdot\text{C}_2\text{H}_3+\text{NO}$ 反应更具有实际意义.

**关键词** [烯丙基自由基\( \$\cdot\text{C}\_3\text{H}\_5\$ \)](#) [一氧化氮\(NO\)](#) [势能面](#)

分类号 [0641](#)

## A Theoretical Study on the Potential Energy Surface of the Reaction $\cdot\text{C}_3\text{H}_5+\text{NO}$

ZHANG Hao, SUN Yan-Bo, LI Ze-Sheng, SUN Chia-Chung

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China

**Abstract** In this article, the singlet potential energy surface of the reaction  $\cdot\text{C}_3\text{H}_5+\text{NO}$  was studied at CCSD(T)/6-311G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p) levels. The most favorable pathway leading to the product P1( $\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HCN}$ ) is as follows:  $\text{R}(\text{CH}_3\text{CHC}\cdot\text{H}+\text{NO})\rightarrow\text{m1}(\textit{trans}\text{-}\text{CH}_3\text{CHCHNO})\rightarrow\text{m2}(\textit{cis}\text{-}\text{CH}_3\text{CHCHNO})\rightarrow\text{m8}(\text{CCNO four-member ring})\rightarrow\text{P1}(\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HCN})$ . In the title reaction, other products P2( $\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HNC}$ ), P3( $\text{H}_2\text{CO}+\text{CH}_3\text{CN}$ ) and P4( $\text{CH}_3\text{CCH}+\text{HNO}$ ) have also lower energies than the reactant, but the pathways leading to these products are all unfeasible in dynamics so that they are minor product channels. The comparison with the analogous  $\text{C}_2\text{H}_3+\text{NO}$  reaction was discussed. The two systems were analogous in the channels leading to the most favorable products P1 except that the former is feasible in kinetics and the latter is opposite.

**Key words** [Allyl radical\( \$\cdot\text{C}\_3\text{H}\_5\$ \)](#) [Nitric oxide\(NO\)](#) [Potential energy surface](#)

DOI:

### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(233KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“烯丙基自由基\( \$\cdot\text{C}\_3\text{H}\_5\$ \)” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张浩](#)

· [孙延波](#)

· [李泽生](#)

· [孙家锺](#)