

研究论文

CH_{4-n}F_n(n=1~3)与CH₃氢抽提反应微观动力学的理论研究

冯丽霞¹, 王文亮¹, 李琳¹, 王渭娜¹, 罗琼^{1,2}, 李前树^{1,2}

1. 陕西师范大学化学与材料科学学院, 西安 710062;
2. 北京理工大学理学院, 北京 100081

收稿日期 2005-8-25 修回日期 网络版发布日期 2006-9-21 接受日期

摘要 采用量子化学的QCISD(T)/6-311+G(d,p)//BHandHLYP/6-311G(d,p)方法研究了氟代甲烷H_{4-n}F_n(n=1~3)与CH₃自由基氢抽提反应的微观动力学性质. 并利用Polyrate程序分别计算了3个反应在200~3 000 K范围内的速率常数. 计算结果表明, R1a, R2a和R3三个反应路径的反应能量分别为-12.7, -9.5和11.8 kJ/mol, 相应的能垒依次为67.0, 62.2和67.5 kJ/mol. 在437 K时, $k^{CVT/SCT}$ 分别为 6.72×10^{-19} , 8.01×10^{-18} 和 8.82×10^{-20} cm³/(molecule·s). 计算结果还表明, 在低温段反应的量子隧道效应显著, 在计算温度范围内变分效应对反应速率常数的影响可以忽略.

关键词 [H4-nFn\(n=1~3\)](#) [氢抽提反应](#) [QCISD\(T\)//BHandHLYP](#) [速率常数](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

王文亮 wlwang@snnu.edu.cn

作者个人主页: 冯丽霞¹; 王文亮¹; 李琳¹; 王渭娜¹; 罗琼^{1,2}; 李前树^{1,2}

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(509KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“H4-nFn\(n=1~3\)”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [冯丽霞, 王文亮, 李琳, 王渭娜, 罗琼, 李前树](#)