

论文

NCO自由基与O和N反应的理论研究

赵晓雷, 姬越蒙, 刘靖尧, 李泽生

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

摘要:

采用密度泛函和量子化学从头算方法, 对NCO自由基和O, N原子反应的势能面进行了理论研究, 讨论了主要的反应通道. 这两种自由基反应的机理比较类似, 初始都有两种进攻方式. NCO与O的主反应通道是O原子从N端无势垒加合, 经过一低垒过渡态, 得到稳定产物P1(CO+NO), 而对NCO与N反应得到了一完整反应通道和无垒加合产物.

关键词: NCO 势能面 反应机理 自由基

Theoretical Study of the Reaction of NCO Radical with O, N atoms

ZHAO Xiao-Lei, JI Yue-Meng, LIU Jing-Yao, LI Ze-Sheng\*

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

Abstract:

The potential energy surface of radical-radical reactions between NCO and O, N were investigated theoretically with the density function theory and *ab initio* method at CCSD(T)/6-311G(d)//B3LYP/6-311G(d) level. The main reaction paths were discussed. The mechanisms of the two reactions are similar, and both have two initial association ways. For the reaction NCO+O, the reaction path through which O atom was initially associated with N atom of NCO and then the adduct passed a low barrier to yield product P1 (CO+NO) is the most favorable path. For the reaction NCO+N, one reaction path was found and the initial intermediate complex was obtained by a barrierless process for N—N association.

Keywords: NCO Potential energy surface Reaction mechanism Radical

收稿日期 2007-02-13 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 李泽生

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(255KB)

[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

本文关键词相关文章

▶ NCO

▶ 势能面

▶ 反应机理

▶ 自由基

本文作者相关文章

▶ 赵晓雷

▶ 姬越蒙

▶ 刘靖尧

▶ 李泽生

▶ 赵晓雷

▶ 姬越蒙

▶ 刘靖尧

▶ 李泽生

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

1. Miller J. A., Bowman C. T., Prog. Energy Combust. Sci.[J], 1989, 15: 287—338
2. Gao Y. D., Macdonald R. G., J. Phys. Chem. A[J], 2003, 107: 4625—4635
3. Becker K. H., Kurtenbach R., Schmidt F., *et al.*. Combustion Flame[J], 2000, 120: 570—577
4. Schacke H., Schmatjko K., Wolfrum J.. Archivum Processow Spalania[J], 1974, 5: 363—370
5. Brownsword R. A., Hancock G., Heard D. E.. J. Chem. Soc., Faraday Trans.[J], 1997, 93(15): 2473—2475
6. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.*. Gaussian 03, Revision C.02[CP], Wallingford C. T.: Gaussian Inc., 2004
7. Lide D. R.. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th Ed.[M], Boca Raton: CRC Press, 2003

#### 本刊中的类似文章

1. 潘秀梅,刘颖,袁慧娟,李泽生,孙家锺,王荣顺 .6-亚甲基环戊二烯酮与氢氰酸反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 700-703
2. 周玉芝,张绍文,李前树 .CF<sub>3</sub>C(O)O<sub>2</sub>+HO<sub>2</sub>反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1496-1499
3. 张浩,孙延波,李泽生,孙家锺 .烯丙基自由基(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)与一氧化氮(NO)反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2390-2393
4. 赵迎宪,危凤,虞影.USHY分子筛催化剂上2-甲基戊烷异构化反应机理[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1846-1853
5. 孙仁安,张旭,韩克利 .SiHCl<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>气相外延生长Si单晶反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1695-1698
6. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锺 .O+HCNO反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1329-1332
7. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锺 .O+HCNO反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1329-1332
8. 于广涛,李飞,于健康,黄旭日,孙家锺 .NC<sub>2</sub>S<sup>+</sup>离子的结构和稳定性的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1957-1961
9. 卢俊瑞,马霞苗,刘梅,尹宁,陈立然,鲍秀荣 .邻氨基二苯醚类重氮盐的水解及分子内缩合反应[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2081-2085
10. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锺 .NO+HCCCO反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 170-173
11. 艾纯芝,孙仁安,王长生,马琳,杨凌 .己烷催化异构化反应中氢溢流机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 182-186
12. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锺 .H+HCNO反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 365-368
13. 王岩,方德彩,刘若庄 .Lewis碱稳定的硼代苯与亲二烯体的Diels-Alder反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 1005-1010
14. 迟绍明,王宁,马丽英,方芳,田国才,李国宝,徐四川 .NO<sub>3</sub><sup>-</sup>+Cl<sub>2</sub>→ClONO<sub>2</sub>+Cl<sup>-</sup>反应势能面和势能阱[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1228-1233
15. 田玫,杨丽娟,崔瑞海,张恒彬,毕晶.对甲基苯酚电催化氧化机理[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1420-1423
16. 李鑫,程津培.S-亚硝基-N-乙酰基-D,L-青霉胺二肽分子中S—NO键断裂能的测定[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1569-1572
17. 周中军,刘慧玲,黄旭日,孙家锺.预测[C,O,S]体系的稳定异构体[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1641-1643
18. 赵莹,孙家锺,黄旭日.NC3O分子体系的异构化及其结构和性能的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2457-2461
19. 赵丽珍,吕文彩,李晓平,秦薇.Ti, Na与O<sub>2</sub>反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2440-2447
20. 沈军,方涛,黎书华,江元生.基于CASSCF参考函数的块相关耦合簇方法对烷烃中单键解离势能面研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2341-2344
21. 刘莉,朱荣秀,张冬菊,刘成卜.甲醇协助丙交酯开环聚合反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2420-2424
22. 田玫,杨丽娟,崔瑞海,张恒彬,何芳,刘艳春 .对甲基苯酚在不同催化剂电极上的电氧化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2254-2257
23. 刘巧云,梅连瑞,朱晓晴,程津培 .维生素A在胶束溶液中衰变动力学及机理研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 297-301
24. 石国升,丁益宏.H<sub>2</sub>NO<sup>+</sup>自由基和顺-2-丁烯反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 382-386

#### 文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
----	----	-----	----	----	----

