

## 气相中 $\text{CrO}_2^+$ 和 $\text{H}_2$ 反应的理论研究

陈晓霞;王永成;耿志远;高立国;方冉;张兴辉

西北师范大学化学化工学院, 甘肃省高分子材料重点实验室, 兰州 730070

### 摘要:

用密度泛函UB3LYP/6-311++G(3df, 3pdpd)//6-311G(2dd, p)方法计算研究了在二重态和四重态两个势能面上的气相反应:  $\text{CrO}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CrO}^+ + \text{H}_2\text{O}$ . 对影响反应机理和反应速率的势能面交叉进行了讨论, 并运用Hammond假设和Yoshizawa等的内禀反应坐标(IRC)单点垂直激发计算的方法找出了势能面交叉点(crossing point (CP)). 运用碎片分子轨道(fragment molecular orbital(FMO))理论, 对初始复合物2IM1和4IM1的轨道相关进行了分析, 解释了 $\text{CrO}_2^+$ 活化H—H  $\sigma$ 键及 $\text{H}_2$ 迁移的机理.

关键词: 活化H—H键 势能面交叉 碎片分子轨道

收稿日期 2005-06-10 修回日期 2005-08-19 网络版发布日期 2006-01-15

通讯作者: 王永成 Email: wangyc@nwnu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1183KB)

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

▶ 活化H—H键

▶ 势能面交叉

▶ 碎片分子轨道

本文作者相关文章

▶ 陈晓霞

▶ 王永成

▶ 耿志远

▶ 高立国

▶ 方冉

▶ 张兴辉