引用信息: CHEN Xiao-xia; WANG Yong-cheng; Geng Zhiy-Yuan; GAO Li-guo; FANG Ran; ZHANG Xing-hui. Acta Phys. -Chim. Sin., 2006, 22(01): 59-64 [陈晓霞; 王永成; 耿志远; 高立国; 方冉; 张兴辉. 物理化学学报, 2006, 22(01): 59-64]

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

气相中CrO2+和H2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: $CrO_2^+ + H_2 \rightarrow CrO^+ + H_2 O$. 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 CrO_2^+ 活化H—H σ 键及 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