

Au⁺(¹S, ³D)与N₂O(¹Σ⁺)反应机理的理论研究

吕玲玲; 王永成

天水师范学院生命科学与化学学院, 甘肃 天水 741000; 西北师范大学化学化工学院, 兰州 730070

摘要:

采用密度泛函B3LYP方法, O和N用6-311+G*基组, Au+用赝势基组(8s7p6d)/[6s5p3d], 研究了Au+(1S, 3D)离子和N₂O(1Σ⁺)分子的反应机理. 报道了在基态单重态和激发三重态势能面上各反应物、中间体和过渡态的构型特征及能量. 结果表明, 两个主反应通道Au+(1S)+ N₂O(1Σ⁺)→1NA-Complex-1→1NA-TS1→1NA-Complex-2→1NA-Crossing→[3OAU⁺NN]+和Au+(1S)+ N₂O(1Σ⁺)→1NB-Complex→1NB-Crossing→[Au⁺NN(1Σ⁺)]++O(3P)都需经过反应交叉势能面, 出现“系间窜越”. 用内禀坐标单点计算垂直激发态的方法确定了势能面交叉点, 并用含时密度泛函TD-B3LYP方法进一步探讨了自旋翻转机理.

关键词: Au+(1S, 3D) N₂O(1Σ⁺) 密度泛函理论 反应机理 系间窜越

收稿日期 2005-08-08 修回日期 2005-09-22 网络版发布日期 2006-03-10

通讯作者: 吕玲玲 Email: lvling100@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1720KB)

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

▶ Au+(1S, 3D)

▶ N₂O(1Σ⁺)

▶ 密度泛函理论

▶ 反应机理

▶ 系间窜越

本文作者相关文章

▶ 吕玲玲

▶ 王永成