

CH自由基与O₂反应得从头算研究

汪志祥;刘若庄;黄明宝

北京师范大学化学系, 北京 100875; 中国科学院研究生院, 3908信箱, 北京 100039

摘要:

关键词: 从头算 CH自由基 反应机理

收稿日期 1997-01-14 修回日期 1997-03-04 网络版发布日期 1997-05-15

通讯作者: 黄明宝 Email:

本刊中的类似文章

1. 汪志祥;刘若庄;黄明宝.NFCI自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 105-108
2. 冀永强;冯文林;郝茂荣;李会英.CH₃NO₂和CH₃自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 721-726
3. 吕鑫;徐昕;王南钦;廖孟生;张乾二.CO在Cu/ZnO上吸附的簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 1005-1009
4. 郭建新;王彦妮;张启元.氧基苯阴离子与CO₂间的内球电子转移[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 193-197
5. 赵文娜;邹建卫;商志才;郭明;俞庆森.结合三维静电势参数研究二取代苯的定量结构-疏水性关系 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 600-603
6. 郑康成;饶火瑜;何峰;许值涛;刘汉钦.Fe、Co、Ni双齿巯基配合物从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(04): 299-304
7. 卢秀慧;王沂轩;邓从豪.硅烯与乙烯环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(04): 332-336
8. 陈界豪;王艳;冯文林.丙酮酸和苯甲酰甲酸热分解反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 1999,15(05): 431-435
9. 李光平;张华北;田安民;鄢国森.AIC_n及AIC_n⁺ (n=1-4)原子簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(03): 211-217
10. 张绍文;傅孝愿.HNCO热解为CO₂和HNCO的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(11): 1004-1008
11. 陈宝吉;陈德展;刘奉岭;宁世光.合成环氧乙烷新途径的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(07): 591-596
12. 张敬来;曹泽星;顾健德;田安民;鄢国森.Si₂分子基态和低激发态的电子结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 396-398
13. 许小红;武海顺;张聪杰;周伟良.B₂Be₂簇的结构与成键性质的研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1065-1071
14. 武海顺;许小红;张聪杰;周伟良.金属硼化物结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 258-263
15. 张嵩;朱荣淑;王艳梅;张冰.对二甲苯分子和离子态振动光谱的理论计算 [J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 553-556
16. 李来才;钱一鸣;朱元强;田安民.CH₃+HNCO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 228-232
17. 李来才;田安民.CH₃(²A')自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 626-629
18. 卢秀慧;王沂轩;邓从豪.二氯卡宾与甲醛环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 784-788
19. 糜骏;冯文林;李会英;刘坤辉;蒲敏.H+CH₂CO反应机理的G2计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 483-487
20. 邹建卫;蒋勇军;胡桂香;曾敏;庄树林;俞庆森.多氯联苯的定量结构-性质(活性)关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 267-272
21. 邹建卫;俞庆森;朱龙观.2(1H)-吡啶酮互变异构体系取代效应的理论计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1040-1042
22. 丁涪江;张良辅;苏克和.HNNH₃的从头计算研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(11): 1006-1010
23. 周立新;田安民;鄢国森.1,2-二硫-3, 4-二硫方酸的从头计算[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 684-687
24. 庞先勇;冯文林;王艳;张绍文.CH₃与NO在单、三态势能面上的反应机理[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 391-395

扩展功能

本文信息

PDF(496KB)

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

▶ 从头算

▶ CH自由基

▶ 反应机理

本文作者相关文章

▶ 汪志祥

▶ 刘若庄

▶ 黄明宝

25. 苏克和;文振翼;胡小玲;李秀仪;王育彬.NH⁰⁻¹⁺₂₋₃ 离解能等的高级 $ab\ initio$ 计算与评价[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 385-390
26. 杨忠志 刘永军.精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H₂O)₁₋₉ 9种低能结构的计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 928-934
27. 王洪涛;韩奎;李艳.[Li...X]e^{-[1]}(X=FH, OH₂, NH₃)的光电性质从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1468-1472
28. 延辉;苑世领;刘成卜.烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 8-12
29. 阚蓉蓉;刘洪梅;叶原丰;李鹏;尹星;赵健伟.外电场作用下寡聚苯分子导线的性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 671-675
30. 许旋;徐志广;罗一帆.紫杉醇的核磁共振谱及其分子几何构型的从头算研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 420-425
31. 胡海泉.硝基氢异构化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 544-547
32. 谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山.硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和 $ab\ initio$ 比较[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 307-314
33. 杨娥;周立新;章永凡. β -D-核糖 (RI) 与一价、二价金属离子相互作用的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 253-259
34. 夏树伟;隋卫平;陈国华;夏少武.羧甲基壳聚糖衍生物及其振动光谱的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 248-252
35. 刘建军;封继康;付伟;任爱民;刘桂霞.¹CH₂+N₂O反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 586-593
36. 周立新;黄尊行;田安民;吴立明;胡建明;李俊篋.C₄S^{m-}₄ 相对稳定性的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 752-756
37. 张燕军;李宗和;曹晓燕.HCN和氯反应动力学及产物振动态分布的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 10-14
38. 薛英;谢代前;鄢国森.氟磺酸氟振动光谱的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 138-142
39. 王义贵;孙昌俊;蔡政亨;邓从豪.碱金属烯醇盐的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 116-120
40. 曹晓燕;王伟;王东;葛茂发;王殿勋.1,2,5-噻二唑衍生物电子结构的紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 491-495
41. 陈波珍;黄明宝;苏红梅;孔繁敖.CH₂+O₂反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 869-872
42. 杨明理;孙泽民;鄢国森.聚脲分子的非线性光学极化率[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 693-697
43. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦.草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 204-209
44. 石土金;刘力;杨达林;朱起鹤.1,4-二氧六环和氨分子氢键团簇的从头算[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 416-421
45. 苏克和;魏俊;胡小玲;岳红;吕玲;王育彬;文振翼.优化几何构型对高级别从头算能量的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 718-723
46. 武海顺;许小红;张聪杰.锥形硼烷B₅H₁₀X的结构和成键性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 627-631
47. 张冬菊;胡海泉;刘永军;步宇翔;刘成卜.Co(H₂O)₆²⁺/3+ 体系电子转移反应动力学的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 855-859
48. 雷鸣;冯文林;徐振峰.羟基钴催化氢甲酰化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 522-526
49. 侯华;王宝山;顾月妹.F+NCO反应的机理和动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 517-521
50. 刘丹;陈光巨;刘若庄;傅孝愿.2-溴乙酸气相热消除反应的机理探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 872-876
51. 邝平先;陈波珍;黄明宝.C(³P)与H₂S反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 389-392
52. 李淑瑾;曹阳;冯建文;施卫平;周伟群.聚吡咯、聚甲基吡咯电子能带结构的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 890-894
53. 孟令鹏;郑世钧;蔡新华.氧原子与二硫化碳反应的机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 990-996
54. 周立新;莽朝永;章永凡.1,2-二硫方酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 15-21
55. 石土金;李宗和;刘若庄.HNCO+OH-→H₂O+NCO的反应机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 247-252
56. 何丽针;陈光巨;刘若庄.丙烯热反应生成甲基环戊烷的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 308-312
57. 谷希斌;王光俊;黄建华;陈茂笃;韩克利;何国钟;楼南泉.266nm激光光解间氟溴苯和对氟溴苯[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1062-1066
58. 李会英;冯文林;冀永强;徐振峰;雷鸣.CH₂O+O(³P)→CHO+OH反应途径和变分速率常数 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 446-450
59. 郭明;邹建卫;赵文娜;商志才;俞庆森.基于三维静电势参数研究C₆₀溶解性的构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 432-435
60. 卢秀慧;刘成卜;邓从豪.二氟硅烯与甲醛环加成反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 78-81
61. 胡海泉;刘成卜.双自由基CF₂与O₃的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1104-1107

62. 张树东;朱湘君;王艳;孔祥和. 甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
63. 刘若庄;马思渝;李宗和.CH与H₂分子反应动力学及选态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
64. 王洪涛;李艳;韩奎;郑植仁;王炳强;李志儒 .X...H₂O (X=Li, Na, K) 非线性光学性质的从头算理论[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1423-1426
65. 丁涪江;张良辅;李广年.半正交化基近似计算的改进[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 307-312
-