

NH+O₃→ONH+O₂反应热力学和动力学研究

司维江; 嵯淑萍; 居冠之

山东理工大学化学工程学院, 淄博 255049; 南京大学配位化学国家重点实验室, 南京 210093

摘要:

在量子化学对NH自由基与臭氧O₃反应计算的基础上, 应用统计热力学方法研究了100~1600 K温度范围内NH和O₃反应过程的各热力学量的变化及平衡常数, 用经Wigner校正的Eyring过渡态理论计算了不同温度下该反应两不同反应通道的活化热力学量、反应速率常数及频率因子. 计算表明, 相对于反应通道II, 反应通道I不仅有很强的反应自发性, 而且在动力学上也是较容易实现的反应.

关键词: NH活性自由基 臭氧O₃ 热力学及动力学研究

收稿日期 2003-04-04 修回日期 2003-06-23 网络版发布日期 2003-10-15

通讯作者: 嵯淑萍 Email: zhuosp@sdut.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(1222KB)

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

▶ NH活性自由基

▶ 臭氧O₃

▶ 热力学及动力学研究

本文作者相关文章

▶ 司维江

▶ 嵯淑萍

▶ 居冠之