

H+HNCO→NH₂+CO的反应机理及动态学计算

马思渝,冀永强,刘若庄

北京师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用从头算方法研究了H+HNCO→NH₂+CO的反应机理: 首先经过H₂NCO中间体, 并为反应的控制步骤。在此基础上, 计算了控制步骤的反应途径, 沿反应途径的动态学性质和正则变分过渡态理论的速率常数。结果表明, 反应存在返回效应和隧道效应, 反应途径的曲率对隧道效应影响较大, 用变分过渡态方法和小曲率近似方法分别进行校正是有效的。

关键词 [胺](#) [反应机理](#) [一氧化碳](#) [氢](#) [从头计算法](#) [反应速度常数](#) [异氰酸](#) [过渡态](#)
[国家教委高等学校博士学科点专项科研基金](#)

分类号 [0641](#)

Calculations on the mechanism and dynamics of the reaction H+HNCO→NH₂+CO

MA SIYU,JI YONGQIANG,LIU RUOZHUANG

Abstract The mechanism of the reaction H+HNCO→NH₂+CO that the first step producing an intermediate H₂NCO complex is a controlling step has been calculated by ab initio MO method. On this basis, the reaction path, the dynamical properties along the reaction path and CVT (canonical variational theory) rate constants of the controlling step were investigated. The results show that the recrossing and tunneling effects exist and the corrections by means of CVT method and small curvature approximation method are efficient respectively.

Key words [AMINES](#) [REACTION MECHANISM](#) [CARBON MONOXIDE](#) [HYDROGEN](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [REACTION RATE CONSTANT](#) [ISOCYANIC ACID](#) [TRANSITION STATE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(314KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“胺”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [马思渝](#)
- [冀永强](#)
- [刘若庄](#)