



云南大学学报(自然科学版) » 2005, Vol. 27 » Issue (1): 64-70 DOI:

化学

最新目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

◀ Previous Articles | Next Articles ▶▶

南极冰表面上ClONO₂与Cl⁻的反应机理研究

方芳, 迟绍明, 田国才, 陶建民, 李国宝

云南师范大学, 化学化工学院, 云南, 昆明, 650092

Study of reaction mechanism of ClONO₂ with Cl⁻ on ice surface of the South Pole

FANG Fang, CHI Shao-ming, TIAN Guo-cai, TAO Jian-min, LI Guo-bao

College of Chemistry and Chemical Engineering, Yunnan Normal University, Kunming 650092, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (1245 KB) HTML (KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

摘要 采用密度泛函理论计算方法B3LYP和基组6-31G(d,p),对ClONO₂+Cl⁻(H₂O)_n⁻Cl₂+NO₃⁻(H₂O)_n(n=0,1,2)的反应机理进行了理论计算研究.研究发现,随着参与反应的水分子数n的增加,反应活化能垒降低.计算结果表明,在冰表面上,水一方面通过氢键的参与形成环形团簇复合物降低活化能;另一方面,水分子作为桥,辅助分子间质子发生迁移,加快反应进程,对反应起到一定的催化作用.这与实验观察到的结果相一致.

关键词: 密度泛函理论 冰表面 硝酸氯 氯离子 臭氧空洞

Abstract: The reaction mechanism of ClONO₂+Cl⁻(H₂O)_n⁻Cl₂+NO₃⁻(H₂O)_n(n=0,1,2) has been studied by using B3LYP/6-31G(d,p) method. The results show that the activation energy barrier drops drastically as the increase of number of water molecules involved in the reaction. Water molecules should participate the formation of circular compound through hydrogen band and reduce energy barrier. At same time, water molecules should act as a bridge, which makes protons transfer easily on ice. The deduction is agreed with experimental results.

Key words: density functional theory ice surface chlorine nitrate chlorine anion ozone hole

收稿日期: 2004-06-10;

基金资助:国家自然科学基金资助项目(29763002);云南省自然科学基金资助项目(2002B0032M)

引用本文:

方芳,迟绍明,田国才等. 南极冰表面上ClONO₂与Cl⁻的反应机理研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2005, 27(1): 64-70.

FANG Fang, CHI Shao-ming, TIAN Guo-cai et al. Study of reaction mechanism of ClONO₂ with Cl⁻ on ice surface of the South Pole[J]. , 2005, 27(1): 64-70.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 方芳
- ▶ 迟绍明
- ▶ 田国才
- ▶ 陶建民
- ▶ 李国宝

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版: 云南大学学报编辑部 (昆明市翠湖北路2号, 650091)

电话: 0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com