

OCIO与OH反应机理的理论研究

赵岷,潘秀梅,刘朋军,孙昊,苏忠民,王荣顺

东北师范大学化学学院功能材料化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用密度泛函B3LYP/6-311+G**和级电子相关倒映合簇CCSD(T)/6-311+G**方法研究了OCIO与OH反应的微观机理, 研究表明: 该反应经过缔合、H转移和离解等复杂过程, 最终得到四种产物, 分别为HOCl+O₂, HCl+O₃, ClO+HO₂和HOClO₂, 从能量上看, 形成HOCl+O₂和HCl+O₃的通道更容易进行, 而形成ClO+HO₂的通道在动力学上是最不利的。

关键词 [密度泛函理论](#) [过渡态理论](#) [次氯酸](#) [氧](#) [缔合](#) [反应机理](#)

分类号 [0621](#)

Theoretical Study on the Reaction Mechanism of OCIO with OH

Zhao Min, Pan Xiumei, Liu Pengjun, Sun Hao, Su Zhongmin, Wang Rongshun

Institute of Functional Material Chemistry, Faculty of Chemistry, Northeast Normal University

Abstract The reaction mechanism of OCIO with OH has been studied using the B3LYP/6-311 + G** and the high-level electron-correlation CCSD(T)/6-311 + G** at single-point. The results show that four products of HOCl + O₂, HCl + O₃, ClO + HO₂ and HOClO₂ can be obtained by association, H-shift and dissociation. In view of energy, the channels to yield HOCl + O₂ and HCl + O₃ are more favorable, but the route to products ClO + HO₂ is kinetically most difficult.

Key words [DFT](#) [TRANSITION STATE THEORY](#) [HYPOCHLORIC ACID](#) [OXYGEN](#) [ASSOCIATION](#) [REACTION MECHANISM](#)

DOI:

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“密度泛函理论”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [赵岷](#)
- [潘秀梅](#)
- [刘朋军](#)
- [孙昊](#)
- [苏忠民](#)
- [王荣顺](#)

通讯作者