

第四章 結論

在本論文研究的 Cyanocarbene radical (HCCN) 與 NO 反應產生的反應機制與動力學探討可以歸納出下列幾點：

1. 從計算出來的反應位能曲面圖 (PES)，將所有路徑的計算結果做比較後，可以預測在 HCCN+NO 的反應中是最有利於形成 **P1** (HCN+NCO)，其最高的相對能障 **TS11** 只有 -5.85 kcal/mol，為最低的能障，所以我們選擇這條路徑為主要路徑。
2. 應用 Fukui function 的方法以及 HSAB 理論中，了解到 HCCN 與 NO 的反應中，IM1 與 IM2 是最穩定的，所以最容易形成，而 IM3 與 IM5 是次之，最後 IM6 與 IM4 則是因為能量最高，故最不易形成。
3. 由 VTST 與 RRKM 理論所計算的速率常數可以得知，在 He 在 760torr，溫度 $T = 298-3000$ K 時的條件下 $k_{\text{total}} = 1.40 \times 10^{-7} T^{-2.01} \exp(3.15 \text{ kcal mol}^{-1}/RT) \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。在 HCCN+NO 的反應中，溫度低於 1200 K 時，主要是由 *cis*-HC(NO)CN (**IM1**) 與 *trans*-HC(NO)CN (**IM2**) 為主要產物。溫度高於 1200 K 時，則是較容易形成 **P1** (HCN+NCO)，且 **P3** (HCNO+CN) 相對的具有競爭性 (圖 11)。