

Reaction of atomic hydrogen with formic acid.

Autorzy

Qian Cao

Sławomir Berski

Zdzisław Latajka

Markku Räsänen

Leonid Khriachtchev

Rok wydania

2014

Czasopismo

Physical Chemistry Chemical
Physics

Numer woluminu

16

Strony

5993-6001

DOI

10.1039/c3cp55265a

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

We study the reaction of atomic hydrogen with formic acid and characterize the radical products using IR spectroscopy in a Kr matrix and quantum chemical calculations. The reaction first leads to the formation of an intermediate radical trans-H₂COOH, which converts to the more stable radical trans-cis-HC(OH)₂ via hydrogen atom tunneling on a timescale of hours at 4.3 K. These open-shell species are observed for the first time as well as a reaction between atomic hydrogen and formic acid. The structural assignment is aided by extensive deuteration experiments and ab initio calculations at the UMP2 and UCCSD(T) levels of theory. The simplest geminal diol radical trans-cis-HC(OH)₂ identified in the present work as the final product of the reaction should be very reactive, and further reaction channels are of particular interest. These reactions and species may constitute new channels for the initiation and propagation of more complex organic species in the interstellar clouds.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1039/c3cp55265a>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.rsc.org/>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-22 20:19:15

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/ZSH2utY>.