

Cl+HCl非反应截面和速率常数的TST-CEQ研究III

陈德展,居冠之

山东大学化学系;南京大学化学化工学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文将TST-CEQ方法推广用于计算非反应弛豫速率和平均截面,并以Cl+HCl反应为例作了计算,与文献结果比较表明,这种推广是可行的,此外,还给出了该体系反应和非反应一维态速率常数;结果发现,低温时非反应弛豫速率大于反应速率;高温时两种通道速率相近,表现了反应的竞争机理。

关键词 [氯化氢](#) [碰撞截面](#) [动力学研究](#) [速率常数](#) [TST-CEQ](#) [弛豫速率](#) [平均截面](#)

分类号 [0643](#)

TST-CEQ study on nonreactive rate and cross section of Cl+HCl system

CHEN DEZHAN, JU GUANZHI

Abstract The TST-CEQ method is generalized to calculate the nonreactive relaxed rate constants and average cross sections. The calculations are carried out by taking the reaction Cl+HCl as an example. The results compared with the literature show that this is feasible. In addition, the collinear reactive and nonreactive state to state rates are also given in the paper. It is shown that the nonreactive rates larger than the reactive ones at relatively low temperature. And at high temperature the rates for reactive channel approach to the nonreactive ones, which indicates a competitive mechanism of the reaction.

Key words [HYDROGEN CHLORIDE](#) [COLLISION CROSS-SECTIONS](#) [KINETIC STUDY](#) [RATE CONSTANTS](#)
[TST-CEQ](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(367KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“氯化氢”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [陈德展](#)
- [居冠之](#)