

化学动力学中隧道效应的研究 I. 甲醛单分子热反应中隧道效应的研究

陈玉, 赵成大

东北师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用不对称Eckart势垒研究了甲醛单分子热解体系, 改进了Forst的工作并计算了不同热效应条件下的一系列反应速率常数及相应的活化能, 在考虑隧道效应的条件下详细讨论了势垒不对称性对计算结果的影响. 计算结果与实验结果一致.

关键词 [反应动力学](#) [甲醛](#) [反应速度常数](#) [势垒](#) [隧道效应](#) [热反应](#)

分类号 [0643](#)

Study on tunneling effect in the chemical kinetics. I. study on tunneling in thermal unimolecular reaction of formaldehyde

CHEN YU, ZHAO CHENGDA

Abstract Using one-dimensional unsym. Eckart potential energy barrier, thermal reaction system of formaldehyde was studied. In addition, a series of rate constants and activation energies have been calculated at different thermal effects and the effect of unsymmetry of potential barrier on the results of calcns. has been discussed in detail. The results of calcns. are in agreement with experimental results.

Key words [REACTION KINETICS](#) [FORMALDEHYDE](#) [REACTION RATE CONSTANT](#) [POTENTIAL BARRIER](#) [TUNNELING EFFECT](#) [HOT REACTION](#)

DOI:

通讯作者

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“反应动力学”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [陈玉](#)

· [赵成大](#)