

土卫六大气中H₂和N⁺反应的动力学研究

葛素红;董光兴;程新路;杨向东

河西学院物理系, 甘肃 张掖 734000; 四川大学原子分子物理研究所, 成都 610065

摘要:

依据Titan大气的压强和温度条件计算了N⁺+H₂→NH⁺+H反应的热化学函数. 结果发现, 该反应是一个吸热反应, 在Titan的低温环境中不具有反应自发性. 运用量子化学理论计算研究了反应的动力学性质, 发现该反应在300 K温度下的反应速率k=4.16×10⁻¹⁰ cm³•mol⁻¹•s⁻¹, 在实验室温度下(298.15 K)的反应势垒是109.847 kJ•mol⁻¹. 依据Titan电离层气压温度条件计算了90 Pa压强条件下1 K到5000 K温度范围内(极低温度和极高温度)的反应活化能和反应速率, 研究发现低温下该反应的反应速率非常低, 而且, 随着温度的降低, 反应速率急剧降低. 理论计算值和文献中的实验值也符合得较好, 理论计算数据可以为星际分子的模拟实验提供一定的参考.

关键词: Titan 动力学 活化自由能 反应速率

收稿日期 2006-03-07 修回日期 2006-05-16 网络版发布日期 2006-10-11

通讯作者: 葛素红 Email: gesuhong@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(176KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ Titan

▶ 动力学

▶ 活化自由能

▶ 反应速率

本文作者相关文章

▶ 葛素红

▶ 董光兴

▶ 程新路

▶ 杨向东