

## 两体扰动势和H<sub>2</sub>O通道反应的三原子体系解析势

张文霞; 田凤惠; 陈守刚; 王泽新

山东师范大学化学系, 济南 250014

摘要:

提出了两体扰动势的概念. 通过两体扰动势构造多原子相互作用体系解析势的理论方法, 获得了非线性三原子H<sub>2</sub>O相互作用体系的解析势函数. 用势能面正确描述了O(1D) + H<sub>2</sub> → H<sub>2</sub>O → OH + H通道反应的性质. 理论分析和实验结果非常符合. 该方法比较容易推广构造多原子相互作用体系解析势.

关键词: H<sub>2</sub>O 两体扰动势 三原子体系 解析势能面 通道反应

收稿日期 2002-11-29 修回日期 2003-01-14 网络版发布日期 2003-06-15

通讯作者: 王泽新 Email: wangzexin@sdu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 贺庆林, 胡长文, 张云峰, 张继余, 王恩波, 王凤芝, 赵永志. 柱撑阴离子粘土的合成、表征及催化性能研究(V) [J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 368-371
2. 刘北平; 谭志诚; 南照东; 刘平; 孙立贤; 徐芬. 稀土钬及钬钪丙氨酸配合物的量热与热分析研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(06): 481-485
3. 吴新明; 刘义; 屈松生; 张大顺; 刘平; 王春艳. 稀土脯氨酸配合物[RE<sub>2</sub>(L-Pro)<sub>6</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>6</sub>的标准生成焓测定 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(10): 956-960
4. 任宜霞; 陈三平; 高胜利. Zn(Thr)Ac<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O固态配合物的制备及标准生成焓[J]. 物理化学学报, 2003, 19(11): 1085-1088
5. 刘昌见; 张懿. 铬酸铵钠复盐结晶的热分解[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 218-220
6. 李林尉; 褚德莹; 刘瑞麟. RbCl在H<sub>2</sub>O-DMF混合溶剂中活度系数的测定[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 691-697
7. 许名飞; 万洪文; 胡军成; 望天志; 屈松生. 复盐Zn<sub>2</sub>HfO<sub>6</sub>·1.25H<sub>2</sub>O的热化学研究[J]. 物理化学学报, 2000, 16(01): 76-79
8. 李扬眉; 陈志春; 吕德水; 林贤福. 辣根过氧化物酶活性膜结构及生物电催化性能[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 474-477
9. 王瑞陵; 姚燕; 吴国梁. 电动势法对LiCl-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O体系热力学性质的研究[J]. 物理化学学报, 1993, 9(03): 357-365
10. 李军; 宋彭生; 姚燕; 王瑞陵. KCl-LiCl-H<sub>2</sub>O体系热力学性质的研究[J]. 物理化学学报, 1992, 8(01): 94-99
11. 姚燕; Atkinson, G.. 三元体系Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-CuSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O 25 °C活度系数的研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(01): 57-63
12. 朱文祥; 赵继周; 杨瑞娜; 黄惠忠. 稀土冠醚配合物的XPS研究[J]. 物理化学学报, 1991, 7(03): 371-374
13. 王光信; 赵长贵; 陈宗淇; 张玉苓. 均分散胶体的研究 I. 钇化合物均分散胶体的形成[J]. 物理化学学报, 1991, 7(06): 655-661
14. 温兆银; 林祖纘; 陈昆刚. 一种层状化合物的水热合成及其特性[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 876-880

扩展功能

本文信息

PDF(1593KB)

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

▶ H<sub>2</sub>O

▶ 两体扰动势

▶ 三原子体系

▶ 解析势能面

▶ 通道反应

本文作者相关文章

▶ 张文霞

▶ 田凤惠

▶ 陈守刚

▶ 王泽新