

分子阻障内旋转的配分函数

潘慧云

郑州大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用WIGNER-KIRKWOOD微扰展开法来推导分子阻障内旋转配分函数的近似表示式,准确到 h^2 项,所得公式只包含两个参量(即分子自由旋转配分函数 Q_f 和势垒高度 U_0 与 kT 之比)并可用BESSEL函数来表示,数值计算结果表明,在内旋转转动惯量较大,温度较高这一实用上最为重要的范围内,根据本文中所得公式,对任意的 Q_f 值和 U_0/kT 值,可直接算得阻障势能所产生的熵的修正值($S_{\text{int}} - S_{\text{rigid}}$)/ k ,比用数值求解法较为简单而准确,如计及微扰展开的高次项,还可以在整个温度范围内取得良好的数值结果。不仅如此,本文所得出的解析公式容易推广到多维运动的情况中去,因此较PITZER的数值求解法具有更普遍的意义。

关键词 [分子结构](#) [波函数](#) [空间效应](#) [微扰论](#) [数值计算](#) [配分函数](#) [多维分析](#) [内旋转](#)

分类号 [0641](#)

The partition function for restricted internal rotation of molecule

PAN HUIYUN

Abstract

Key words [MOLECULAR STRUCTURE](#) [WAVE FUNCTIONS](#) [STERIC EFFECT](#) [PERTURBATION THEORY](#) [NUMERICAL COMPUTATION](#) [PARTITION FUNCTION](#) [MULTIDIMENSIONAL ANALYSES](#) [INTERNAL ROTATION](#)

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“分子结构” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

· [潘慧云](#)