

$K + I-2 \rightarrow K^+ + I-2^-$ 离子对生成反应态-态几率与选态截面的量子散射理论研究

冯大诚, 蔡政亭, 邓从豪

山东大学理论化学研究室, 济南(250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用Miller的-矩阵变分法在Aten-Lanting-Los两态势能面上计算了 $K + I-2 \rightarrow K^+ + I-2^-$ 电离反应的态-态几率和选态反应截面, 结果表明了低电离阈能、几率的振荡行为及振动增强效应; 电离截面随碰撞能及 $I-2$ 振动量子数的变化规律与实验预测相吻合; 讨论了反应机理。

关键词 [离子对生成](#) [离子对](#) [电离](#) [反应动力学](#) [变分法](#) [矩阵](#) [量子散射](#) [截面](#) [反应机理](#)
[国家教委高等学校博士学科点专项科研基金](#)

分类号 [0641](#)

Quantum scattering studies on the state-to-state probabilities and selected-state cross sections for ion-pair formation process: $K + I-2 \rightarrow K^+ + I-2^-$

Feng Dacheng, Cai Zhengting, Deng Conghao

Shandong Univ, Theoret Chem Lab, Jinan(250100)

Abstract The state-to-state probabilities and selected-state cross sections of ion-pair formation process $K + I-2 \rightarrow K^+ + I-2^-$ on Aten-Lanting-Los two-state potential energy surface have been calculated using Miller's S-matrix variational approach. The results show that this ionization reaction has low threshold energy, oscillatory probabilities and enhanced-vibrational effect; ionization cross sections as a function of collision energy and the vibrational quantum number of molecule $I-2$ are in agreement with experimental observations as well. Ionization mechanism has been discussed.

Key words [ION PAIRS](#) [IONIZATION](#) [REACTION KINETICS](#) [VARIATIONAL METHOD](#) [MATRICES](#)
[CROSS PROFILE](#) [REACTION MECHANISM](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(211KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“离子对生成”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [冯大诚](#)
- [蔡政亭](#)
- [邓从豪](#)