

引用信息: Fu Xiaoyuan; Jin Suqian. Acta Phys. -Chim. Sin., 1985, 1(06): 504-510 [傅孝愿; 金俗谦. 物理化学学报, 1985, 1(06): 504-510]

[本期目录](#) | [在线预览](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## 研究论文

### H<sub>2</sub>和I<sub>2</sub>反应的赝势法量子化学研究

傅孝愿; 金俗谦

北京师范大学化学系量子化学研究室

摘要:

用赝势价轨道从头算方法并采用双组态行列式波函数, 找出了H<sub>2</sub>与两个碘原子反应形成的直线型过渡态的几何构型。根据这个构型, 利用CIPSI程序进行了微扰CI计算, 得到了反应活化能的近似值。根据所得到的结果对H<sub>2</sub>与I<sub>2</sub>反应的机理进行了探讨, 支持了三分子反应的观点。

关键词:

收稿日期 1985-01-14 修回日期 1985-04-15 网络版发布日期 1985-12-15

通讯作者: Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(2282KB\)](#)

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](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [傅孝愿](#)

▶ [金俗谦](#)