

$\text{X}^1\text{A}_1$ )分子的多体展式分析势能函数,用准经典的Monte-Carlo 轨迹法研究了O+DT (0,0)体系的分子反应动力学过程.结果表明,在碰撞能较低时(<209.20 kJ/mol),可以生成长寿命DTO( $\text{X}^1\text{A}_1$ )络合物,并且该络合反应是有阈能反应,这一结论与用多体项展式理论计算的DTO分子势能曲线结果一致.随碰撞能增加,逐渐出现置换产物OT 和OD,最终分子被完全碰散成D, T 和O 原子,而且反应O+DT (0,0) $\rightarrow$ OT+D, O+DT (0,0) $\rightarrow$ OD+T 和O+DT (0,0) $\rightarrow$ D+T+O 也是有阈能反应.由于D 和T 原子的同位素效应,置换产物OD 与OT 的反应特征存在非对称性.

"/>  
 $\text{A}_1$ ) by Monte-Carlo quasi-classical trajectory approach. It is shown that the reaction O+DT $\rightarrow$ DTO with a long-lived complex has threshold energy at low collision energy, which agrees with the potential surface. The interchange reactions are increased with the collision energy increasing, until the DTO molecules will decompose into D, T, and O completely, and these reactions have threshold energy too. The trajectories and collision sections of O+DT(0,0) $\rightarrow$ D+OT and O+DT(0,0) $\rightarrow$ T+OD present asymmetrical distribution due to the isotopic effect of deuterium and tritium atom, which corresponds to the potential surface.

"/>

Chinese Science Bulletin

精确检索

快速检索

高级搜索

科学通报



卷:



起始页:



GO

首 页 期刊简介 编委会 投稿指南 期刊订阅 广告合作 下载中心 留言板 联系我们 English

科学通报 » 2012, Vol. 57 » Issue (9): 697-702 DOI: 10.1360/972011-1779

论文

## 0+DT 体系分子反应动力学的非对称性

朱志艳<sup>①</sup>, 朱正和<sup>②</sup>, 张莉<sup>②</sup>, 李培刚<sup>①</sup>, 傅景礼<sup>①</sup>

① 浙江理工大学物理系光电材料与器件中心, 杭州 310018;

② 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065

## Asymmetry of molecular reaction dynamics of the O+DT system

ZHU ZhiYan<sup>1</sup>, ZHU ZhengHe<sup>2</sup>, ZHANG Li<sup>2</sup>, LI PeiGang<sup>1</sup>, FU JingLi<sup>1</sup>

1. Department of Physics, Center for Optoelectronics Materials and Devices, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China;

2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China

摘要

图/表

参考文献(O)

相关文章 (15)

点击分布统计

下载分布统计

版权所有 © 《中国科学》杂志社

地址: 北京市东黄城根北街16号, 《科学通报》编辑部, 100717

电话: 010-64036120 E-mail: csb@scichina.org

网络系统维护电话: 010-64034113 E-mail: sys@scichina.org