

Sr+HF体系的动力学研究

刘玉芳,孟慧艳,王永,朱遵略,孙金锋

河南师范大学物理与信息工程学院;

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

应用扩展的LEPS势能面,对处于高碰撞能零振动激发 ($E_{col}=54.18\text{ kJ/mol}$, $v=0$, $j=0$)和低碰撞能低振动激发 ($E_{col}=7.56\text{ kJ/mol}$, $v=1$, $j=0$)两种初始条件下的Sr+HF体系的竞争反应模式、定态分布函数 $Pv(b)$ 以及反应碰撞能对产物SrF转动取向的影响进行了准经典轨线计算,计算结果与实验结果及相关理论符合得很好,且能给予实验以合理的动力学解释.

The quasiclassical trajectory method based on the extended LEPS potential energy surface has been employed here to investigate the reaction mechanism and features in the reaction $\text{Sr}+\text{HF}\rightarrow\text{SrF}+\text{H}$ at two reactional conditions (collision energy $E_{col}=54.18\text{ kJ/mol}$, $v=0$, $j=0$ and $E_{col}=7.56\text{ kJ/mol}$, $v=1$, $j=0$). The dynamical features in the competitive reaction modes are discussed and the stationary distribution function $Pv(b)$ of the product SrF has already been deduced...

关键词 [LEPS势能面](#) [准经典轨线计算](#) [竞争反应模式](#) [转动取向](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 刘玉芳; 孟慧艳; 王永; 朱遵略; 孙金锋

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (143KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“LEPS势能面” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘玉芳](#)

· [孟慧艳](#)

· [王永](#)

· [朱遵略](#)

· [孙金锋](#)