

研究论文

$H+O_2(n_0, j_0) \rightarrow HO+O$ 及 $C+H_2(n_0, j_0) \rightarrow CH+H$ 体系选态反应截面的过渡态理论计算

蔡政亭; 冯大诚; 居冠之

山东大学理论化学研究室, 济南

摘要:

本文用微正则过渡态理论计算了 $H+O_2(n_0, j_0) \rightarrow HO+O$ 和 $C+H_2(n_0, j_0) \rightarrow CH+H$ 在ab initio势能面上的选态反应截面 $\sigma(n_0, j_0)$; E. 分析了势能面性质对反应截面的影响。计算结果表明, 在指定反应物分子的振动态 n_0 、转动态 j_0 时, 两个反应体系的反应截面随相对平动能的增加先是增加后是减小($j_0=1, n_0=0$ 除外); 在给定相对平动能和反应物分子的转动态 j_0 时, 随反应物分子的振动量子数 n_0 的增加, 两个体系的选态反应截面均有较显著的增加, 在指定相对平动能和反应物分子的振动态 n_0 时, $H+O_2$ 体系的选态反应截面随 j_0 的变化较为复杂, 而 $C+H_2$ 体系则比较简单($j_0=1$ 除外)。对于 $H+O_2$ 反应体系, 本文得到的反应截面与实验结果及准经典轨迹理论的计算结果符合得很好。

关键词:

收稿日期 1986-07-07 修回日期 1987-04-13 网络版发布日期 1987-12-15

通讯作者: Email:

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1941KB)

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

▶ 蔡政亭

▶ 冯大诚

▶ 居冠之