

## N<sub>2</sub>O同位素的紫外光解：同位素分馏和产物的转动量子态分布

### UV Photolysis of N<sub>2</sub>O Isotopomers: Isotopic Fractionations and Product Rotational Quantum State Distributions

摘要点击 195 全文点击 74 投稿时间：2011-4-12 采用时间：2011-10-31

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/06/679-685

中文关键词 [时间依赖的量子包](#) [同位素分馏](#) [产物转动态分布](#)

英文关键词 [Time-dependent wavepacket](#) [Isotopic fractionation](#) [Product rotational distribution](#)

基金项目

作者

单位

E-mail

[Mohammad Noh Daud\\*](#)

[吉隆坡马来亚大学化学系, 吉隆坡50603](#)

[mnoh@um.edu.my](mailto:mnoh@um.edu.my)

中文摘要

采用时间依赖的量子波包法研究<sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O、<sup>14</sup>N<sup>15</sup>N<sup>16</sup>O、<sup>15</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O、<sup>15</sup>N<sup>15</sup>N<sup>16</sup>O、<sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>17</sup>O和<sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>18</sup>O

英文摘要

The time-dependent quantum wave packet method is used to study the dynamics of the photodissociation processes for the isotopomers <sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O, <sup>14</sup>N<sup>15</sup>N<sup>16</sup>O, <sup>15</sup>N<sup>15</sup>N<sup>16</sup>O, <sup>15</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O, <sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>17</sup>O, and <sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>18</sup>O. In general, the computed isotopic fractionation factors derived from the absorption cross sections of five heavy isotopomers are in good agreement with the experimental results. Relative to the <sup>14</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O isotopomer, the N<sub>2</sub> rotational state distributions for the isotopically nitrogen substituted N<sub>2</sub>O are found to be entirely shifted to higher rotational states. Similar to its isotopic fractionation factors, the N<sub>2</sub> rotational state distributions for the asymmetric isotopomers <sup>14</sup>N<sup>15</sup>N<sup>16</sup>O and <sup>15</sup>N<sup>14</sup>N<sup>16</sup>O are found to be observably different.

Copyright©2007 IOPP

承办：中国科学技术大学 协办：中国科学院大连化学物理研究所  
主管：中国科学技术协会 主办：中国物理学会 国际代理发行：英国物理学会

编辑部地址：安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼  
联系电话：0551-3601122 Email: [cjcp@ustc.edu.cn](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计