

同位素对Ca+HCl, Ca+DCI, Ca+TCI反应立体动力学性质的影响 Isotopic Effects on Stereodynamics for Ca+HCl, Ca+DCI, and Ca+TCI Reactions

摘要点击 173 全文点击 68 投稿时间: 2011-5-22 采用时间: 2011-9-13

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/06/686-690

中文关键词 [同位素效应](#) [立体动力学](#) [准经典轨线](#) [矢量相关](#)

英文关键词 [Isotopic effect](#) [Stereodynamics](#) [Quasi-classical trajectory](#) [Vector correlation](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
王立志	山东大学物理与电子科学学院, 济南250014 ; 鲁东大学物理学院, 烟台264025	
杨传路*	鲁东大学物理学院, 烟台264025	yangchuanlu@263.net
梁景娟	山东大学物理与电子科学学院, 济南250014	
肖静	鲁东大学物理学院, 烟台264025	
张庆刚	山东大学物理与电子科学学院, 济南250014	

中文摘要

基于准经典轨线方法和Verbockhaven等人通过多参考组态相互作用计算建立的势能面研究了Ca+HCl/Ca+DCI/Ca+TCI反应中的矢量相关效应. 计算和分析了 $P(\theta_r)$ 和 $P(\Phi_r)$ 以及 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$

英文摘要

The vector correlations in Ca+HCl, Ca+DCI, and Ca+TCI reactions have been investigated by means of the quasi-classical trajectory calculations on PES constructed by means of multireference configuration interaction. The distributions of $P(\theta_r)$, $P(\Phi_r)$ and the PDDCSs of $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$ have been calculated based on the surface. The remarkable isotopic effects in the reactions are observed, and the mechanism which may be ascribed to different mass factors is discussed.

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

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计