

## N+ND反应的量子力学速率常数

### Quantum Mechanics Rate Constant for the N+ND Reaction

摘要点击 251 全文点击 88 投稿时间: 2011-8-1 采用时间: 2011-8-31

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/547-550

中文关键词 [非绝热量子动力学](#) [N+ND→N<sub>2</sub>+D](#) [速率常数](#)

英文关键词 [Nonadiabatic quantum dynamical calculation](#) [N+ND→N<sub>2</sub>+D reaction](#) [Rate constant](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
<a href="#">张爱杰</a>	<a href="#">中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连116023</a>	
<a href="#">何国钟*</a>	<a href="#">中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连116023</a>	<a href="mailto:gzhe@dicp.ac.cn">gzhe@dicp.ac.cn</a>

中文摘要

在两个耦合的势能面 $1^2A'$ 和 $2^2A'$ 上对N+ND反应进行了非绝热量子动力学研究. 计算了N+ND→N<sub>2</sub>+D反应和N'+ND→N'D+N反应在5 meV~1.0 eV碰撞能的反应几率和积分截面. 结果发现N+ND→N<sub>2</sub>+D反应是N+ND反应的主要反应通道. 另外, 计算了N+ND→N<sub>2</sub>+D反应的速率常数.

英文摘要

We present nonadiabatic quantum dynamical calculations on the two coupled potential energy surfaces ( $1^2A'$  and  $2^2A'$ ) [J. Theor. Comput. Chem. 8, 849 (2009)] for the reaction. Initial state-resolved reaction probabilities and cross sections for the N+ND→N<sub>2</sub>+D reaction and N'+ND→N'D+N reaction for collision energies of 5 meV to 1.0 eV are determined, respectively. It is found that the N+ND→N<sub>2</sub>+D reaction is dominated in the N+ND reaction. In addition, we obtained the rate constants for the N+ND→N<sub>2</sub>+D reaction which demand further experimental investigations.

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