

采用准经典轨迹的方法研究碰撞能对 $C+CD \rightarrow C_2+D$ 反应的影响

Quasi-classical Trajectory Study of $C+CD \rightarrow C_2+D$ at Different Collision Energy

摘要点击 391 全文点击 143 投稿时间: 2011-5-26 采用时间: 2011-7-12

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/04/373-377

中文关键词 [准经典轨迹](#) [极化微分反应截面](#) [立体动力学](#)

英文关键词 [Quasi-classical trajectory](#) [Stereodynamics calculation](#) [Polarization dependent generalized differential cross-section](#) [Stereodynamics](#)

基金项目

| 作者 | 单位 | E-mail |
|---------------------|--|--|
| 石英* | 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春130012 | shi_ying@jlu.edu.cn |
| 解廷献 | 大连交通大学数理系, 大连1160 | |
| 金明星 | 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春130012 | |

中文摘要

运用准经典轨线方法, 基于 $1^2A'$ 势能面[Mol. Phys. 98, 1925(2000)], 从理论上研究了碰撞能对 $C+CD \rightarrow C_2+D$ 反应的立体动力学性质的影响, 计算并且详细讨论了与产物矢量相关的三个极化分布函数 $P(\theta_r)$, $P(\varphi_r)$ 和 $P(\theta_r, \varphi_r)$. 此外, 在质心坐标系中,²研究了碰撞能对两个极化微分反应截面的影响. 结果表明, 产物 C_2 的立体动力学性质对反应物分子的碰撞能非常敏感.

英文摘要

Quasi-classical trajectory calculations have been employed to investigate the influence of collision energy on the stereodynamics of the title reaction $C+CD \rightarrow C_2+D$ on the potential energy surface of the $1^2A'$ state developed by Boggio-Pasqua *et al.* [Mol. Phys. 98, 1925 (2000)]. The product angular distributions which reflect the vector correlation have been calculated. In addition, two polarization-dependent different cross-sections are also presented in the center-of-mass frame respectively. The results indicate that the product C_2 is sensitively affected by collision energy.

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