

引用信息: Sun Benfan; Xu Meiyun; He Guozhong; Lou Nanquan . Acta Phys. -Chim. Sin., 1988, 4(04): 401-405 [孙本繁;徐美云;何国钟;楼南泉. 物理化学学报, 1988, 4(04): 401-405]

[本期目录](#) | [在线预览](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## 研究论文

### 三原子反应散射内态角分布的准经典计算

孙本繁; 徐美云; 何国钟; 楼南泉

中国科学院大连化学物理研究所

摘要:

本工作利用分子反应动力学的准经典理论计算了原子与双原子分子三维反应散射产物内态振转角分布, 并得出振动分支比这一重要动态学信息。计算采用了半经验的LEPS形式的解析势能面。初始碰撞参数利用普遍使用的Monte Carlo方法确定。本文给出 $F+H_2(D_2)\rightarrow HF(DF)+H(D)$ 反应的计算结果, 并与最新交叉分子束实验进行了广泛的比较, 得到完全一致的规律。

关键词:

收稿日期 1986-10-15 修回日期 1987-07-18 网络版发布日期 1988-08-15

通讯作者: 徐美云 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1731KB\)](#)

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](#)

[▶ 孙本繁](#)

[▶ 徐美云](#)

[▶ 何国钟](#)

[▶ 楼南泉](#)