

## D+CH<sub>4</sub>反应的SVRT含时波包理论研究

刘新国; 张庆刚

山东师范大学物理系, 济南 250014

摘要:

基于Jordan和Gilbert势能面,用SVRT(semirigid vibrating rotor target)模型,对D+CH<sub>4</sub>反应进行了含时波包动力学研究,计算得到了不同初始振动转动态的总反应几率、积分散射截面和热速率常数.计算结果与H+CH<sub>4</sub>反应进行了比较和讨论.反应几率随平动能的变化曲线呈现出显著的量子共振特性.通过对j=0时,v=0、1、2的反应几率的计算,看出H-CH<sub>3</sub>的振动激发极大地提高了反应几率,而反应阈能明显降低,说明反应分子的振动能对分子的碰撞反应有重要贡献.对v=0时,j=0、1、2、3的反应几率的计算,得出转动量子数j的增大也会使反应几率有较大的提高,但反应阈能基本不变.

关键词: 散射截面 速率常数 含时波包

收稿日期 2003-10-14 修回日期 2003-12-10 网络版发布日期 2004-05-15

通讯作者: 刘新国 Email: liuxinguo@sdnu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1348KB)

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

▶ 散射截面

▶ 速率常数

▶ 含时波包

本文作者相关文章

▶ 刘新国

▶ 张庆刚