

氢原子共线交换反应的动力学计算 **Cl**与**HCl**反应几率的振荡现象研究

居冠之,陈德展

山东大学化学学院理论化学研究室;山东师范大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 我们利用超球坐标对共线 $\text{Cl} + \text{HCl}(v=3) \rightarrow \text{ClH}(v' \leq 3) + \text{Cl}$ 作了一维精确量子计算,计算所用势能面是LEPS型, $E_t = -3.23 \text{ kJ/mol}$, 得到了态态反应几率等动力学信息, 通过分析结果发现, 反应是振动绝热的, 即以对角($v'=v$)反应几率为主, 非对角($v' \neq v$)反应几率小于0.1, 反应几率随总能量表现出强裂地振荡, 在有阱的势能面上动力学共振增强。

关键词 [反应机理](#) [反应动力学](#) [氯](#) [量子化学](#) [交换反应](#) [氯化氢](#) [振荡](#) [氢原子](#) [一维](#) [势能面](#)

分类号 [0641](#)

Quantum calculations on the collinear reaction $\text{Cl} + \text{HCl}$. I study on oscillations of the reaction

JU GUANZHI, CHEN DEZHAN

Abstract for the collinear reaction $\text{Cl} + \text{HCl}(v=3) \rightarrow \text{ClH}(v' \leq 3) + \text{Cl}$ using hyperspherical coordinates. An LEPS potential energy surface with a shallow well depth of -3.22 kJ/mol was used in the calcns. The state-to-state reaction probabilities were calculated. The diagonal ($v = v'$) reaction probabilities dominate over the off-diagonal ($v \neq v'$) reaction probabilities and the largest off-diagonal reaction probability is < 0.1 . The reaction probabilities show oscillations as a function of energy. Dynamic resonances are more pronounced for the potential energy surface with a well.

Key words [REACTION MECHANISM](#) [REACTION KINETICS](#) [CHLORINE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [EXCHANGE REACTION](#) [HYDROGEN CHLORIDE](#) [OSCILLATION](#) [HYDROGEN ATOM](#) [ONE-DIMENSIONAL](#) [POTENTIAL ENERGY SURFACES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [HTML全文\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“反应机理”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [居冠之](#)

· [陈德展](#)