

转动取向影响因素的多元非线性分析

杜凤沛;陈兰;蔡遵生;赵学庄

中国农业大学理学院应用化学系,北京 100094;南开大学化学系,天津 300071

摘要:

在不同拓扑特征的London-Eying-Polanyi-Sato(LEPS)型势能面上,应用经典轨线法计算了不同动态条件下的58个样本,应用多元非线性分析方法研究了势能面及动态条件对转动取向的影响.结果表明,对于 $A+BC\rightarrow AB+C$ 类反应,反应物分子的质量比、势能面出口处的宽度和相对平动能对产物分子的转动取向有重要作用,且发现不同影响因素之间的乘积对产物的转动取向具有更重要的作用.

关键词: 分子反应动力学 转动取向 模式识别

收稿日期 2003-07-23 修回日期 2003-09-19 网络版发布日期 2004-02-15

通讯作者: 杜凤沛 Email: dufp@cau.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 杜凤沛;陈兰;蔡遵生;赵学庄.微观化学反应产物分子能量分配的模式识别[J].物理化学学报, 2005,21(02): 214-217

扩展功能

本文信息

[PDF\(1522KB\)](#)

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

▶ [分子反应动力学](#)

▶ [转动取向](#)

▶ [模式识别](#)

本文作者相关文章

▶ [杜凤沛](#)

▶ [陈兰](#)

▶ [蔡遵生](#)

▶ [赵学庄](#)