

## O(<sup>3</sup>P)+HBr(DBr)反应的含时量子散射计算

左国平; 唐壁玉; 韩克利

湘潭大学物理学院, 湖南 湘潭 411105; 湘潭大学现代物理研究所, 湖南 湘潭 411105; 中国科学院大连化学物理研究所, 分子反应动力学国家重点实验室, 辽宁 大连 116023

### 摘要:

基于LEPS势能面, 用三维含时量子波包法对O(<sup>3</sup>P)+HBr(DBr)反应进行了准确的动力学计算. 计算的结果表明, 振动激发对这个反应是有效的, 而转动激发在某一能量范围内具有方位效应. 计算得到了该反应的速率常数和反应截面, 速率常数k<sub>O+HBr</sub>的计算值同实验值符合得很好. 通过对相应结果的对比, 可以发现这个反应具有比较明显的同位素效应.

关键词: 含时量子波包法 速率常数 反应截面

收稿日期 2005-01-20 修回日期 2005-03-09 网络版发布日期 2005-09-15

通讯作者: 唐壁玉 Email: tangbiyu@xtu.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\(168KB\)](#)

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

▶ [含时量子波包法](#)

▶ [速率常数](#)

▶ [反应截面](#)

本文作者相关文章

▶ [左国平](#)

▶ [唐壁玉](#)

▶ [韩克利](#)