

离子对生成反应截面的量子散射理论研究

冯大诚,慕宇光,蔡政亭,邓从豪

山东大学理论化学研究室,济南(250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 将Miller的S-矩阵变分法推广到离子对生成反应动力学的研究。 $M + X \sim 2 \rightarrow M^+ + X \sim 2^-$ 反应体系包括共价态($M + X \sim 2$)和离子态($M^+ + X \sim 2^-$)两个势能面及其交叉效应,本文在此两态模型下导出了生成截面公式。在矩阵元计算中,平动波函数采用分布Gauss基作展开。作为上述公式的应用,对 $Cs + O \sim 2 \rightarrow Cs^+ + O \sim 2^-$ 反应体系作了数值计算并取得了满意结果。

关键词 [离子对生成](#) [离子对](#) [反应动力学](#) [变分法](#) [矩阵](#) [量子散射](#) [截面](#)
[国家教委高等学校博士学科点专项科研基金](#)

分类号 [0641](#)

A quantum scattering theoretical study on the reaction cross sections of ion-pair formation processes

Feng Dacheng, Mu Yuguang, Cai Zhengting, Deng Conghao

Shandong Univ, Theoret Chem Lab, Jinan(250100)

Abstract In this paper Mille's S-matrix variational approach has been extended to study the reaction dynamics for ion-pair formation processes. $M + X \sim 2 \rightarrow M^+ + X \sim 2^-$ reaction system involves two potential energy surfaces, i.e., the covalence state ($M + X \sim 2$) and the ionic state ($M^+ + X \sim 2^-$) and their crossing effect. The working equations for calculating ion-pair formation cross section have been derivated based on the above two-state model. The translational wavefunctions have been expanded by distributed Gaussian basis sets in calculation of matrix elements. Satisfactory results of numerical calculations using S-matrix variational approach for $Cs + O \sim 2 \rightarrow Cs^+ + O \sim 2^-$ ion-pair formation system have been obtained.

Key words [ION PAIRS](#) [REACTION KINETICS](#) [VARIATIONAL METHOD](#) [MATRICES](#) [CROSS PROFILE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(211KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“离子对生成”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [冯大诚](#)
- [慕宇光](#)
- [蔡政亭](#)
- [邓从豪](#)