

共线量子散射方法研究D+CID体系

吴韬,沈长圣,居冠之,边文生

南京大学配位化学国家重点实验室.南京(210008);南京大学化学系.南京 (210008);南京大学亚微观固态化学研究所;
山东大学理论化学研究所.济南 (250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

用共线量子散射方法计算D+CID体系的反应几率和传能几率。发现存在很强的振荡现象。体系的碰撞中间态的寿命的计算结果为fs-ps数量级。当某一反应通道打开时,在能量阈值附近通常都伴随着一些长寿命的碰撞中间态。这一点该体系中表现很比较明显。

关键词 [共线量子散射](#) [传能几率](#) [振荡化学反应](#) [D+CID体系](#) [反应几率](#) [碰撞](#) [延迟时间](#) [量子散射](#) [共线理论](#)

分类号 [0641](#)

Collinear quantum dynamics study of D+CID system

Wu Tao, Shen Changsheng, Ju Guanzhi, Bian Wensheng

Nanjing Univ, Coordinat Chem State Key Lab. Nanjing(210008); Nanjing Univ, Dept Chem. Nanjing(210008); Shandong Univ, Inst Theoret Chem. Jinan(250100)

Abstract The reaction probability and the T-V energy transfer probability of D+CID system on mBW2 potential energy surface (PES) were calculated using collinear quantum scattering theory. The calculated results show that there is oscillatory phenomenon. The life period of the collision-middle-state is fs-ps for D+CID system. When a reaction channel is opened, there are some longevous collision-middle-states near the threshold energy. This is very obvious for D+CID system.

Key words [OSCILLATION CHEMICAL REACTION](#) [COLLISON](#) [DELAY TIME](#) [COLLINEAR THEORY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“共线量子散射”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [吴韬](#)

· [沈长圣](#)

· [居冠之](#)

· [边文生](#)