

辛准经典轨迹法研究Cl+H₂反应

沈长圣,吴韬,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);
南京大学化学系亚微观固态化学研究所;山东大学晶体材料国家重点实 验室;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 用辛准经典轨迹法模拟了Cl+H₂反应在mBW2
势能面上的动力学行为。研究了各种初始条件下的反应碰撞截面,产物的能量分配,
角度分布和态分布。另外,我们还比较了反应物的三种能量形式(平动能,转动能和振动能)对反庆的有效性。

关键词 [经典轨迹](#) [氯](#) [氢](#) [辛算法](#) [势能面](#) [反应碰撞截面](#) [态分布](#)

分类号 [0641](#)

Cl+H₂ reaction dynamics from quasiclassical trajectory calculation using symplectic algorithm

Shen Changsheng,Wu Tao,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 cross sections, the product energy partitioning, angular distribution, and the product internal state
distribution for the Cl+H₂ reaction have been calculated and discussed by quasiclassical trajectory (QCT) method with
symplectic integral on a new three-dimensional ab initio potential energy surface (PES), named as mBW2 PES. The
effectivity of the translational, vibrational,and rotational energies is also compared for Cl+H₂ reaction.

Key words [CHLORINE](#) [HYDROGEN](#) [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“经典轨迹”的
相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [沈长圣](#)
- [吴韬](#)
- [居冠之](#)
- [边文生](#)