

# He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 及其同位素取代反应的立体动力学研究<sup>\*</sup>

孔 浩 刘新国<sup>†</sup> 许文武 梁景娟 张庆刚

( 山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014 )

( 2008 年 11 月 4 日收到, 2009 年 1 月 21 日收到修改稿 )

运用准经典轨线方法, 基于 AQUILANTI 势能面, 在碰撞能为 145 kJ/mol 时, 对 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 及其同位素取代反应的立体动力学性质进行了理论研究. 对  $k$ - $j'$  两矢量相关和  $k$ - $k'$ - $j'$  三矢量相关的分布函数, 以及产物转动取向参数进行了详细的讨论. 结果表明, He + HH<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + H, He + HD<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + D 和 He + HT<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + T 反应的立体动力学性质对反应体系的质量因子和双原子分子的排斥能非常敏感.

关键词: 矢量相关, 立体动力学, 准经典轨线方法

PACC: 3450L, 3425, 7920N, 7115Q

## 1. 引 言

作为典型的离子-分子反应, He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 反应在天体物理、等离子体物理和高能物理中有着极其重要的应用. 很多年以来, 这个反应无论在实验上, 还是在理论上都引起了人们的广泛关注<sup>[1-13]</sup>, 被认为是用来测试新的理论和实验结果正确与否的典型体系. 深入地探讨这个反应体系可以帮助我们研究更为复杂的离子-分子反应.

要想认识一个基元化学反应, 不仅要研究它们的标量性质, 还要研究它们的矢量性质, 它能揭示很多关于化学基元反应的立体动力学方面的重要信息, 比如速度和角动量, 不但其值的大小直接与平动能和转动能相关, 而且还能定义反应过程中的方向. 只有把标量和矢量性质结合起来考虑才能给出反应动力学的一个完整图像. 另外, 在计算方面, 经典轨线是一种描述反应体系动力学性质的有效方法, 多年来得到人们的广泛应用<sup>[11-26]</sup>. 而且在大多数情况下, 经典轨线的计算结果与量子动力学的结果基本一致, 如文献<sup>[26]</sup>的结果就说明了这一点.

在 2000 年, Aquilanti 等<sup>[5,6]</sup> 构建了 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 反应的精确势能面. 之后, 基于此势能面, 出现了很多

关于 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 反应的理论研究. 楚天舒等<sup>[9]</sup> 用考虑了科里奥利耦合( Coriolis coupling )的含时波包法研究了该反应的反应几率和反应散射截面, 理论结果与 Tang 等<sup>[8]</sup> 的实验结果基本一致. Tang 等<sup>[10]</sup> 应用含时波包量子散射方法研究了 HD<sup>+</sup> (  $\nu = 0-3, j_0 = 1$  ) + He 碰撞, 结果与实验符合得很好. 近来, 许文武等<sup>[11-13]</sup> 基于同样的势能面, 研究了碰撞能  $E_T = 1.0, 1.5, 2.0$  eV 对 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 和 He + HD<sup>+</sup> 反应的影响以及在碰撞能  $E_T = 1.0$  eV 时 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> / HD<sup>+</sup> 反应的产物转动极化分布. 结果发现对于 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 反应在碰撞能  $E_T = 1.0$  eV 时, 产物的二面角分布中在 270° 时峰值很不明显; 另外, 碰撞能  $E_T = 1.0$  eV 时 He + HD<sup>+</sup> 反应的产物转动角动量矢量在垂直于反应物相对速度矢量的方向上的取向分布程度较弱.

为了获得 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 反应体系的相同位置上 H 原子所有同位素取代反应的理想立体动力学信息, 本文运用准经典轨线方法对 He + HH<sup>+</sup>, He + HD<sup>+</sup> 和 He + HT<sup>+</sup> 反应的矢量相关性进行了详细的研究. 在计算过程中, 反复调节反应的碰撞能, 结果发现在碰撞能为 145 kJ/mol 时, 同位素效应最为明显, 通过比较三个反应的立体动力学性质, 得出了一些有意义的结论.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金( 批准号: 10504017, 10474060, 10874104 ) 教育部科学技术研究重点项目( 批准号: 206093 ) 和山东省自然科学基金( 批准号: Z2007A05, Q2006A06 ) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: liuxinguo@sdu.edu.cn

## 2. 理 论

### 2.1. 矢量相关函数分布

我们选用质心坐标系来描述  $k$  和  $k'$  的分布:如图 1 所示,反应物相对速度  $k$  平行于  $Z$  轴, $Y$  轴垂直于含有反应物相对速度  $k$  和产物相对速度  $k'$  的  $XZ$  平面, $\theta_r$  和  $\phi_r$  分别表示产物转动角动量  $j'$  的极角和方位角.

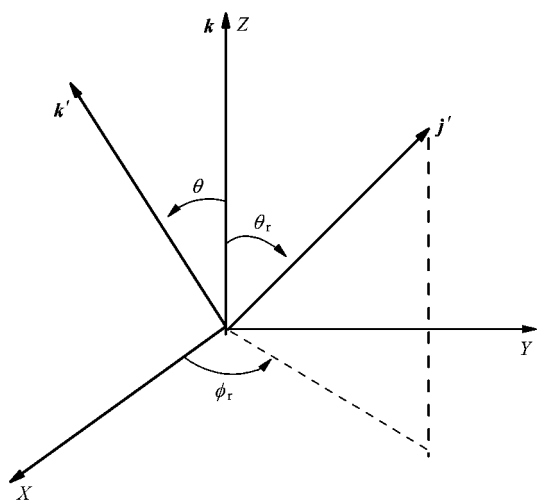


图 1 描述  $k$ ,  $k'$  和  $j'$  分布的质心坐标系

在质心坐标系下,描述原子-双原子分子反应中  $k$  和  $j'$  两矢量相关的函数  $P(\theta_r)$  分布可以展开为一系列的 Legendre 多项式<sup>[17]</sup>

$$P(\theta_r) = \frac{1}{2} \sum_k (2k+1) a_0^{(k)} P_k(\cos\theta_r), \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} a_0^{(k)} &= \int_0^\pi P(\theta_r) P_k(\cos\theta_r) \sin\theta_r d\theta_r \\ &= P_k(\cos\theta_r), \end{aligned} \quad (2)$$

展开系数被称为定向系数(奇数)或取向系数(偶数).

描述  $k$ ,  $k'$  和  $j'$  三矢量相关的函数  $P(\phi_r)$  分布可以用傅里叶级数展开

$$P(\phi_r) = \frac{1}{2\pi} \left( 1 + \sum_{\text{偶数 } n \geq 2} a_n \cos n\phi_r + \sum_{\text{奇数 } n \geq 1} b_n \sin n\phi_r \right), \quad (3)$$

其中  $a_n$  和  $b_n$  分别为

$$a_n = 2 \cos n\phi_r, \quad (4)$$

$$b_n = 2 \sin n\phi_r, \quad (5)$$

在计算中, $P(\phi_r)$  被展开到  $n = 24$ , 分布函数就收敛了.

### 2.2. 产物转动角动量的空间分布

在上述的质心坐标系中,通常用角  $\theta_r$  和  $\phi_r$  定义  $j'$  的方向,产物转动角动量  $j'$  的空间分布可用如下公式展开<sup>[17]</sup>:

$$\begin{aligned} P(\theta_r, \phi_r) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{kq} [k] a_q^k C_{kq}(\theta_r, \phi_r)^* \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_k \sum_{q \geq 0} [a_{q\pm}^k \cos q\phi_r \\ &\quad - a_{q\mp}^k i \sin q\phi_r] C_{kq}(\theta_r, 0), \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $C_{kq}(\theta_r, \phi_r)$  表示修正的球谐函数, $k$  为偶数和奇数时参数  $a_q^k$  分别用下面的公式估计:

$$a_{q\pm}^k = 2 C_{k1q1}(\theta_r, 0) \cos q\phi_r, \quad (7)$$

$$a_{q\mp}^k = 2i C_{k1q1}(\theta_r, 0) \sin q\phi_r. \quad (8)$$

在计算中, $P(\theta_r, \phi_r)$  展开到  $k = 7$  可以得到较好的收敛结果.

### 2.3. 产物转动取向参数

在质心坐标系下,产物的转动角动量  $j'$  可以方便地用 Legendre 多项式来展开<sup>[20]</sup>,其分布函数

$$f(\theta_r) = \sum a_n P_n(\cos\theta_r), \quad (9)$$

其中  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $\theta_r$  是产物的转动角动量  $j'$  和反应物相对速度  $k$  的夹角.

当  $n = 1, 2$  时,

$$P_1(j' \cdot k) = \cos\theta_r, \quad (10)$$

$$P_2(j' \cdot k) = \frac{1}{2} (3\cos^2\theta_r - 1), \quad (11)$$

这里  $P_1(j' \cdot k)$  和  $P_2(j' \cdot k)$  分别是  $P_1(j' \cdot k)$  和  $P_2(j' \cdot k)$  对于整个  $j'$  分布的平均, $P_2(j' \cdot k)$  称为二阶取向参数.

### 2.4. 准经典轨线计算

基于 AQUILANTI 势能面,采用准经典轨线方法,反应物分子的振动和转动量子数为  $\nu = 0$  和  $j = 0$ ,对反应 He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> 及其同位素取代反应进行了详细的立体动力学性质研究.本文所应用的计算程序由韩克利研究小组提供<sup>[17-20]</sup>.计算时,我们选择碰撞能 145 kJ/mol,反应物相对速度  $k$  与产物的转动角

动量  $j'$  的夹角  $\theta_r$  从  $0^\circ$  到  $180^\circ$ ; 描述反应物相对速度  $k$ 、产物相对速度  $k'$  和产物的转动角动量  $j'$  三矢量相关的  $\phi_r$  从  $0^\circ$  到  $360^\circ$ ; 积分步长为  $0.1 \text{ fs}$ , 运行轨线 100000 条; 反应中 He 原子与  $\text{HH}^+$ ,  $\text{HD}^+$  和  $\text{HT}^+$  分子质心之间距离均取为  $25.0 \text{ \AA}$ ;  $\text{He} + \text{HH}^+$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+$  和  $\text{He} + \text{HT}^+$  三个反应的最大碰撞参数  $b_{\text{max}}$  分别为 1.069, 1.118 和  $1.350 \text{ \AA}$ .

### 3. 结果与分析

在碰撞能  $145 \text{ kJ/mol}$  时, 计算了  $\text{He} + \text{HH}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{D}$  和  $\text{He} + \text{HT}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{T}$  三个反应. 图 2 描述了三个反应的反应物相对速度矢量  $k$  和产物的转动角动量矢量  $j'$  两矢量相关的函数  $P(\theta_r)$  的分布. 从图中可以看到, 三个反应  $P(\theta_r)$  分布在  $\theta_r = 90^\circ$  时都存在个极大的峰值, 而且分布关于  $90^\circ$  呈现轴对称分布. 由此推断, 产物转动角动量矢量  $j'$  在垂直于反应物相对速度矢量  $k$  的方向上有强烈的取向分布. 但是, 从图中可以明显看出三个反应的取向程度明显不同, 随替代原子质量的增大在  $\theta_r = 90^\circ$  的峰值逐渐降低,  $\text{He} + \text{HH}^+$  反应的取向程度最大, 峰值最高;  $\text{He} + \text{HD}^+$  的取向程度次之;  $\text{He} + \text{HT}^+$  反应取向程度最小. 描述反应产物极化的一个最简单的方式是利用质心坐标系中的产物转动角动量取向参数  $P_2(j' \cdot k)$  [22]. 图 2 中  $P(\theta_r)$  分布与表 1 所示的三个反应对应的取向参数  $P_2(j' \cdot k)$  是一致的.

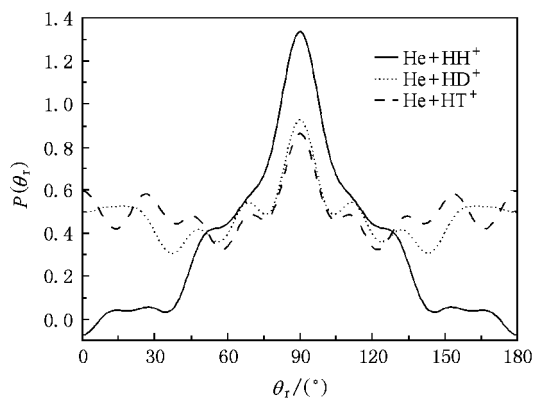


图 2 反应的  $k$ - $j'$  两矢量相关的  $P(\theta_r)$  分布

对于  $\text{A} + \text{BC} \rightarrow \text{AB} + \text{C}$  反应,  $k$ - $j'$  两矢量相关的  $P(\theta_r)$  分布对两个因素较为敏感: 一是势能面的结构特征; 另一个是质量因子  $\cos^2 \beta = m_{\text{A}} m_{\text{C}} / (m_{\text{A}} + m_{\text{B}})$

$(m_{\text{B}} + m_{\text{C}})$  [17, 18, 20]. 在计算过程中三个反应基于同一个势能面,  $P(\theta_r)$  分布的差异可能是由不同质量因子产生的. 质量大的产物原子将带走更多的角动量, 结果导致质量因子的增加将减弱产物转动角动量  $j'$  的各向异性分布. 从表 1 可以看出,  $\text{He} + \text{HH}^+$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+$  和  $\text{He} + \text{HT}^+$  三个反应的质量因子依次增加, 质量因子与三个反应  $P(\theta_r)$  分布一一对应. 为了更好地反映同位素效应, 在图 3 中分别给出了三个反应的  $k$ - $k'$ - $j'$  三矢量相关的  $P(\phi_r)$  分布.

表 1 反应的产物转动角动量取向参数及质量因子

反应体系	$P_2(j' \cdot k)$	$\cos^2 \beta$
$\text{He} + \text{HH}^+$	-0.302	0.399
$\text{He} + \text{HD}^+$	-0.071	0.532
$\text{He} + \text{HT}^+$	-0.032	0.598

图 3 描述了  $\text{He} + \text{HH}^+$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+$  和  $\text{He} + \text{HT}^+$  三个反应的  $k$ - $k'$ - $j'$  三矢量相关的极角分布函数. 发现三个反应的  $P(\phi_r)$  分布关于  $\phi_r = \pi$  不对称, 这种非对称分布反映了角动量的强烈极化. 从图 3 中可以看出,  $\text{He} + \text{H}_2^+$  及其同位素取代反应的  $P(\phi_r)$  分布在  $\phi_r = 90^\circ$  和  $270^\circ$  都存在极大值, 说明了在质心坐标系下产物转动角动量  $j'$  主要取向于  $Y$  轴. 除此之外, 发现分布在  $\phi_r = 90^\circ$  和  $270^\circ$  的峰值不同, 可见  $j'$  不仅存在取向效应而且还有定向效应. 如图 3(a) 所示,  $\text{He} + \text{HH}^+$  反应  $\phi_r = 90^\circ$  的峰值大于  $270^\circ$  的峰值, 说明了产物转动角动量  $j'$  不仅取向于反应物相对速度垂直的方向, 还定向于  $Y$  轴正方向. 在图 3(b) 和 (c) 中, 反应  $\text{He} + \text{HD}^+$  和  $\text{He} + \text{HT}^+$  的  $P(\phi_r)$  分布与  $\text{He} + \text{HH}^+$  反应恰好相反,  $\phi_r = 90^\circ$  的峰值小于  $270^\circ$  的峰值, 说明  $j'$  除了存在取向外, 还定向于  $Y$  轴负方向. 根据瞬时碰撞模型 [23], 产物分子的转动角动量  $j'$  表示为  $j' = L \sin^2 \beta + j \cos^2 \beta + J_1 m_{\text{B}} / m_{\text{AB}}$ , 其中  $L$  是反应物轨道角动量,  $j$  表示反应物转动角动量,  $J_1 = \sqrt{\mu_{\text{BC}} R} (\mathbf{r}_{\text{AB}} \times \mathbf{r}_{\text{CB}}) \cdot \mathbf{r}_{\text{AB}}$  和  $\mathbf{r}_{\text{CB}}$  是 B 原子分别指向 A 原子和 C 原子的单位矢量,  $\mu_{\text{BC}}$  是 BC 分子的约化质量,  $R$  是排斥能, 在化学键断裂与重新形成的过程中,  $L \sin^2 \beta + J \cos^2 \beta$  项是对称的, 但由于  $J_1 m_{\text{B}} / m_{\text{AB}}$  中排斥能的作用, 导致了产物分子的定向效应.

为了获得更多的同位素效应的立体动力学信息, 图 4 分别给出了  $\text{He} + \text{HH}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{D}$  和  $\text{He} + \text{HT}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{T}$  反应对应的产物转动角动量  $j'$  的空间分布, 用函数  $P(\theta_r, \phi_r)$

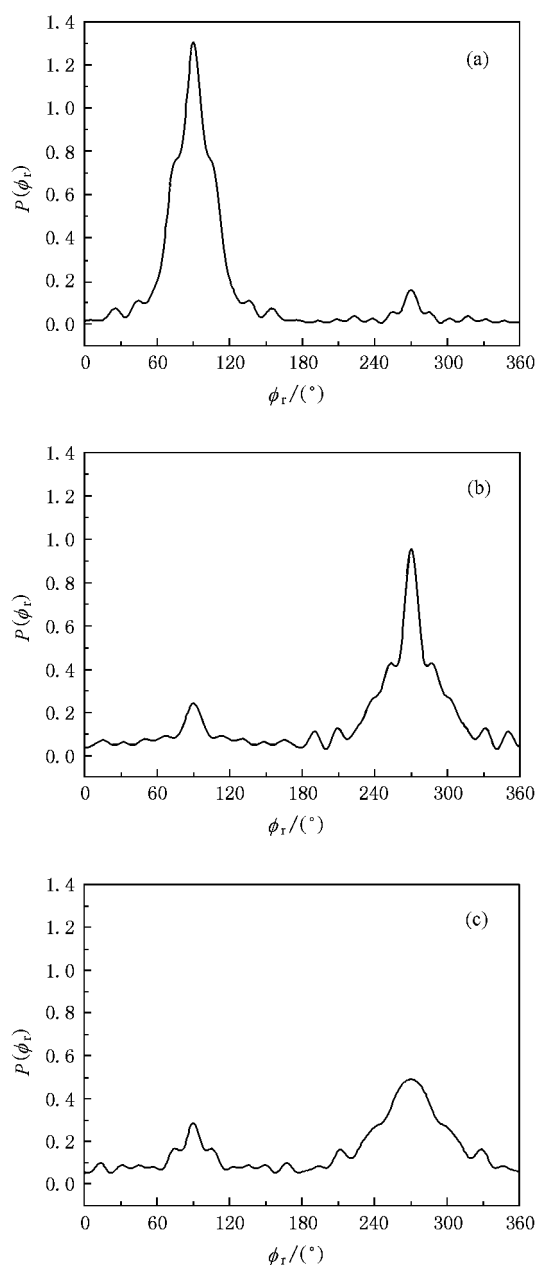


图3 反应的  $k-k'-j'$  三矢量相关的  $P(\phi_r)$  分布 (a)  $\text{He} + \text{HH}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ , (b)  $\text{He} + \text{HD}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{D}$ , (c)  $\text{He} + \text{HT}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{T}$

表示.由图4(a)中很容易看出,对于  $\text{He} + \text{HH}^+$  反应,  $P(\theta_r, \phi_r)$  分布在  $(90^\circ, 90^\circ)$  附近有明显的分布;在图4(b)中,  $\text{He} + \text{HD}^+$  反应在  $(90^\circ, 270^\circ)$  附近存在一个显著分布外,在  $(90^\circ, 90^\circ)$  附近有略微分布;除此之外,在图4(c)中,对于  $\text{He} + \text{HT}^+$  反应,  $P(\theta_r, \phi_r)$  分布除了在  $(90^\circ, 270^\circ)$  附近有一个显著分布外,在  $(90^\circ, 90^\circ)$  附近的也存在较明显的分布,只是前者比后者要显著得多.  $\text{He} + \text{H}_2^+$  及其同位素取代反应的  $P(\theta_r, \phi_r)$  分

布,与图2中  $k-j'$  两矢量相关的  $P(\theta_r)$  分布和图3中  $k-k'-j'$  三矢量相关的  $P(\phi_r)$  分布结果对应一致.

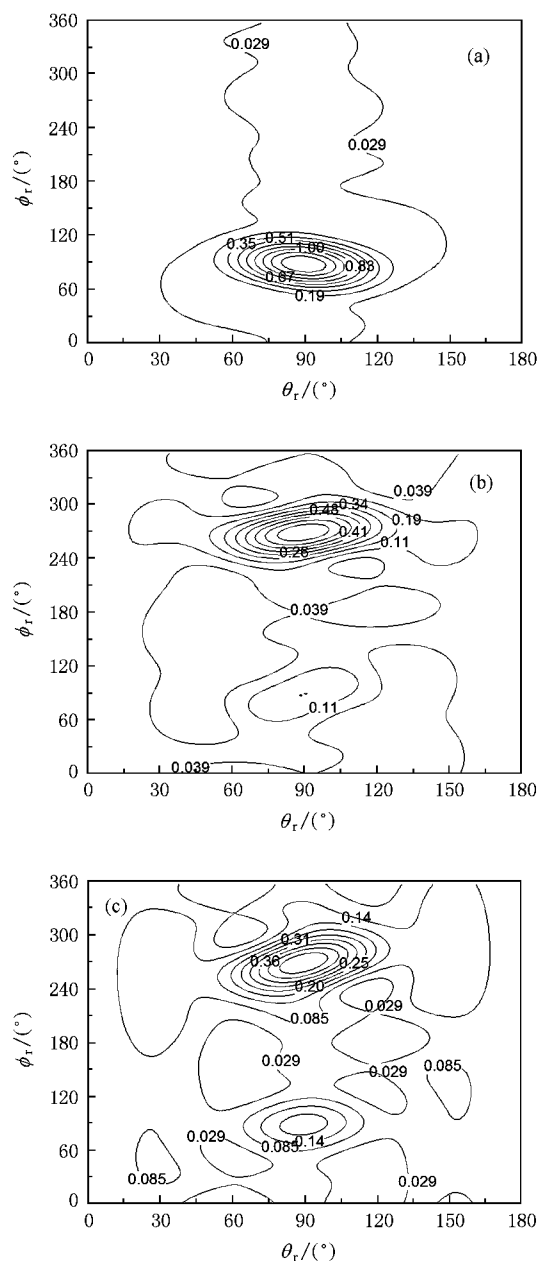


图4 反应的  $P(\theta_r, \phi_r)$  分布 (a)  $\text{He} + \text{HH}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ , (b)  $\text{He} + \text{HD}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{D}$ , (c)  $\text{He} + \text{HT}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{T}$

## 4. 结 论

本文基于 AQUILANTI 势能面,在碰撞能为 145 kJ/mol 时,采用准经典轨线方法,对  $\text{He} + \text{HH}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ ,  $\text{He} + \text{HD}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{D}$  和  $\text{He} + \text{HT}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{T}$  三个反应的产物转动角动量极化进行了研究.计算结果表明,  $\text{He} + \text{H}_2^+$  及其同位素取代反应

中,描述反应物的相对速度矢量  $k$  和产物转动角动量  $j'$  两矢量相关的  $P(\theta_r)$  分布是对称的,而且随取代原子质量的增加,在  $\theta_r = 90^\circ$  的峰值逐渐降低,这意味着产物转动角动量矢量  $j'$  的取向程度逐渐变弱;除此之外,同位素效应对  $k-k'-j'$  三矢量相关的极角分布也产生了较大影响,  $\text{He} + \text{HH}^+$  反应的  $j'$  不仅仅取向于反应物相对速度垂直的方向,还定向于  $Y$  轴

正方向,而反应  $\text{He} + \text{HD}^+$  和  $\text{He} + \text{HT}^+$  的  $j'$  恰好相反,定向于  $Y$  轴负方向.反应体系中产物转动角动量的定向效应可能是由双原子分子的原子之间的排斥能产生的,而反应产物转动角动量极化分布的差异,可能是由反应的质量因子  $\cos^2 \beta$  带来的.总之,排斥能和质量因子对  $\text{He} + \text{H}_2^+$  及其同位素取代反应都产生了较大影响.

- [ 1 ] Chupka W A , Russel M E 1968 *J. Chem. Phys.* **49** 5426
- [ 2 ] Chupka W A , Berkowitz J , Russel M E 1969 *The 6<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions* ( Cambridge , MA : MIT Press ) p71
- [ 3 ] Chupka W A 1972 *Ion-Molecule Reactions* ( New York : Plenum ) p72
- [ 4 ] Aguado A , Paniagua M 1992 *J. Chem. Phys.* **96** 1265
- [ 5 ] Palmieri P , Puzzarini C , Aquilanti V 2000 *Mol. Phys.* **98** 1839
- [ 6 ] Aquilanti V , Capecchi G , Cavalli S 2000 *Chem. Phys. Lett.* **318** 619
- [ 7 ] Chu T S , Zhang Y , Han K L 2006 *Int. Rev. Phys. Chem.* **25** 201
- [ 8 ] Tang X N , Xu H , Ng C Y 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 164301
- [ 9 ] Chu T S , Lu R F , Han K L , Tang X N , Xu H , Ng C Y 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 244322
- [ 10 ] Tang X N , Ng C Y , Chu T S , Han K L 2007 *J. Chem. Phys.* **127** 1
- [ 11 ] Xu W W , Liu X G , Zhang Q G 2008 *Mol. Phys.* **106** 14
- [ 12 ] Xu W W , Liu X G , Luan S X , Sun S S , Zhang Q G 2009 *Chin. Phys. B* **18** 339
- [ 13 ] Xu W W , Liu X G , Luan S X , Zhang Q G 2009 *Chem. Phys.* **355** 21
- [ 14 ] Aoiz F J , Herrero V J , Saez-Rabanos V 1992 *J. Chem. Phys.* **97** 7423
- [ 15 ] Case D E , McClelland G M , Herschbach D R 1978 *Mol. Phys.* **35** 541
- [ 16 ] Miranda M P , Clary D C 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 4509
- [ 17 ] Wang M L , Han K L , He G Z 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 5446
- [ 18 ] Wang M L , Han K L , He G Z 1998 *J. Phys. Chem. A* **102** 20204
- [ 19 ] Han K L , He G Z , Lou N Q 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 8699
- [ 20 ] Chen M D , Han K L , Lou N Q 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 4463
- [ 21 ] Chu T S , Han K L 2008 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 2431
- [ 22 ] Chen M D , Han K L , Lou N Q 2002 *Chem. Phys. Lett.* **357** 483
- [ 23 ] Han K L , He G Z , Lou N Q 1989 *Chin. J. Chem. Phys.* **2** 323
- [ 24 ] Liu X Y , Li Q , Jiang G , Zhu Z H , Chen H D , Jin X X , Tang Y J 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2340 ( in Chinese ) [ 刘晓亚、李 权、蒋刚、朱正和、陈涵德、金行星、唐永建 2000 物理学报 **49** 2340 ]
- [ 25 ] Xue W D , Zhu Z H , Ran M , Wang H Y , Zou L X , Sun Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2503 ( in Chinese ) [ 薛卫东、朱正和、冉鸣、王红艳、邹乐西、孙 颖 2002 物理学报 **51** 2503 ]
- [ 26 ] Ju L P , Han K L , John Zhang Z H 2009 *J. Comput. Chem.* **30** 305

# Stereodynamics study of the reactions of He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> and its isotopic variants<sup>\*</sup>

Kong Hao Liu Xin-Guo<sup>†</sup> Xu Wen-Wu Liang Jing-Juan Zhang Qing-Gang

( College of Physics and Electronics , Shandong Normal University , Jinan 250014 , China )

( Received 4 November 2008 ; revised manuscript received 21 January 2009 )

## Abstract

The stereodynamics in the chemical reaction He + H<sub>2</sub><sup>+</sup> and its isotopic variants at the collision energy of 145 kJ/mol have been studied by using the quasi-classical trajectory ( QCT ) method on AQUILANTI surface. The correlated  $k\text{-}j'$  ,  $k\text{-}k'\text{-}j'$  angular distributions , and the product rotational alignment are discussed in detail. The calculations indicate that the stereodynamics of the reactions of He + HH<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + H , He + HD<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + D and He + HT<sup>+</sup> → HeH<sup>+</sup> + T are sensitive to the mass factor and the repulsive energy of diatomic molecule.

**Keywords** : vector correlation , stereodynamics , quasi-classical trajectory method

**PACC** : 3450L , 3425 , 7920N , 7115Q

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10504017 , 10474060 , 10874104 ) , the Key Program of Science and Technology of Ministry of Education of China ( Grant No. 206093 ) , and the Natural Science Foundation of Shandong Province , China ( Grant Nos. Z2007A05 , Q2006A06 ) .

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : liuxinguo@sdu.edu.cn