

# 碰撞能及反应物振动激发对 $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$ 反应立体动力学性质的影响\*

胡梅 刘新国<sup>†</sup> 谭瑞山

(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

(2013年9月25日收到; 2013年10月22日收到修改稿)

基于我们最近所构建的  $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}(1^2A')$  反应的新势能面, 采用准经典轨线法研究了碰撞能分别为 0.48, 0.77, 1.24 eV 以及能量为 0.48 eV 时反应物不同振动态下  $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$  反应的立体动力学性质. 结果显示在给定的碰撞能情况下, 以及当反应物振动量子数由 0 变到 2 时计算的积分反应截面与实验值符合得较好. 通过比较发现, 碰撞能对此反应  $\mathbf{k}-\mathbf{j}'$  关联函数  $P(\theta_r)$  分布的影响大于其受振动激发的影响, 并且关于  $\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{j}'$  三矢量相关的函数  $P(\phi_r)$  分布以及极化微分反应截面对碰撞能较敏感, 同时发现振动激发对  $P(\phi_r)$  分布和极化微分反应截面也有较大的影响.

**关键词:** 准经典轨线法, 积分反应截面, 矢量相关, 极化微分反应截面

**PACS:** 34.50.Lf, 87.15.H-, 34.50.-s

**DOI:** 10.7498/aps.63.023402

## 1 引言

多年来, 人们已经对吸热的原子-分子离子反应  $\text{Ar} + \text{H}_2^+$  做过大量的实验以及理论研究. 实验方面, 人们通过一系列实验技术观察并测量了  $\text{ArH}_2^+$  体系的电荷转移过程 ( $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{H}_2$ ) 和质子转移过程 ( $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$ ). Campbell 等<sup>[1-3]</sup> 利用 Photoelectron-Photoion Coincidence Spectroscopy 技术研究了振动能在高能条件下对本体系的电子转移过程的影响. Farrar 等<sup>[4-6]</sup> 选取相对比较大的碰撞能范围, 对  $\text{ArH}_2^+$  体系的质子传递过程和电子转移过程进行了交叉分子束实验. 研究表明, 在低碰撞能 0.4 eV 时, 反应的三个原子之间依然呈现出重要的吸引相互作用, 但是在碰撞能比较高的区域,  $\text{ArH}_2^+$  体系表现出直接反应的性质. 他们还研究了产物的平动能分布情况. Houle 等<sup>[7,8]</sup> 运用 Extensive Vibrational State Selected Guided Beam 方法研究了反应体系  $\text{Ar} + \text{H}_2^+$

的化学反应过程和电子转移过程. 文献<sup>[9-13]</sup> 对  $\text{Ar} + \text{H}_2^+(X, v')$  反应态-态分辨的反应截面进行了理论和实验研究. Qian 等<sup>[14]</sup> 运用脉冲场电离光电子的二次离子巧合方法测量了此反应的振转激发反应截面.

理论上, Kuntz 和 Roach<sup>[15]</sup> 构建了此反应近似三维半经验的 DIM (diatomics-in-molecules) 势能面, 他们给出了该体系的线性态的势能面是吸引型势能面, 即在反应物分子互相接近过程中发生放能, 而在出口谷处存在一个势垒. 后来在这个近似三维半经验势能面上, 动力学理论研究有了很大的发展. 1979 年, Bear 和 Beswick<sup>[16]</sup> 研究了  $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$  反应的电子转移. 1985 年, Chapman<sup>[17]</sup> 利用 TSH 模型研究了此反应的电子转移及反应截面. 1997 年, Aguilon 和 Sizun<sup>[18]</sup> 利用准经典耦合波包方法对此反应做了动力学研究.

$\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$  反应体系在高能状态下是很容易发生化学反应的, 这值得我们做进一步的研究. 然而最早的势能面是 1972 年 Kuntz 和

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11274205) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: liuxinguo@sdu.edu.cn

Roach 构造的 DIM 势能面, 但是 DIM 势能面的计算方法不够精确. 基于以上原因, 我们研究小组采用 UCCSD(T)/aug-cc-pV5Z 方法构建了一个从头算势能面<sup>[19]</sup> (LLZ 势能面). 虽然计算能量的方法能比较好地描述相互作用区, 但是在渐近区, 从头算结果会出现不收敛的情况. 实际上, 我们发现 LLZ 势能面在渐近区不够光滑, 也就导致了势能面不很精确. 因此我们用多参考组态相互作用 (MRCI+Q)/aug-cc-pVQZ 方法构建了一个全新精确的电子基态 ( $1^2A'$ ) 势能面<sup>[20]</sup>. 而最近几年立体反应动力学得到了较快的发展及研究<sup>[21-28]</sup>, 因此为进一步揭示此反应的动力学性质及反应机理, 本文运用准经典轨线方法, 在新建的精确势能面的基础上, 研究了能量和反应物振动激发对  $\text{Ar}+\text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^++\text{H}$  反应立体动力学性质的影响.

## 2 理 论

在准经典轨线法 (QCT) 计算中采用的势能面解析势能函数为多体展开形式<sup>[29,30]</sup>

$$V_{\text{ABC}}(R_{\text{AB}}, R_{\text{BC}}, R_{\text{AC}}) = V_{\text{A}}^{(1)} + V_{\text{B}}^{(1)} + V_{\text{C}}^{(1)} + V_{\text{AB}}^{(2)}(R_{\text{AB}}) + V_{\text{BC}}^{(2)}(R_{\text{BC}}) + V_{\text{AC}}^{(2)}(R_{\text{AC}}) + V_{\text{ABC}}^{(3)}(R_{\text{AB}}, R_{\text{BC}}, R_{\text{AC}}), \quad (1)$$

其中单体项  $V_{\text{A}}^{(1)}, V_{\text{B}}^{(1)}, V_{\text{C}}^{(1)}$  是三个分立原子的能量, 我们取为 0;

二体项表示为

$$V_{\text{AB}}^{(2)} = C_0 \frac{\exp(-\alpha_{\text{AB}} R_{\text{AB}})}{R_{\text{AB}}} + \sum_{i=1}^N c_i \rho_{\text{AB}}^i, \quad (2)$$

其中  $\rho_{\text{AB}} = R_{\text{AB}} \exp(-\beta_{\text{AB}} R_{\text{AB}})$ ,  $N = 10$ ;

三体项为

$$V_{\text{ABC}}^{(3)}(R_{\text{AB}}, R_{\text{AC}}, R_{\text{BC}}) = \sum_{ijk}^M d_{ijk} \rho_{\text{AB}}^i \rho_{\text{AC}}^j \rho_{\text{BC}}^k, \quad (3)$$

其中  $M = 10, i+j+k \leq M, i+j+k \neq i \neq j \neq k$ .

计算中反应概率和积分反应截面的公式为

$$P = \frac{N_{\text{r}}}{N}, \quad (4)$$

$$\sigma_{\text{r}} = \pi b_{\text{max}}^2 (N_{\text{r}}/N), \quad (5)$$

其中  $N_{\text{r}}$  表示反应碰撞轨线数,  $N$  表示总碰撞轨线数,  $b_{\text{max}}$  表示最大碰撞参数,  $P$  为反应概率,  $\sigma$  为积分反应截面.

本文计算中所使用的矢量相关函数是在质心坐标系下来描述的, 具体表述形式详见文献<sup>[31-40]</sup>. 本文所选取的四个极化微分反应截面 (PDDCSs)  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_{\text{t}})$ ,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_{\text{t}})$ ,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_{\text{t}})$  和  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_{\text{t}})$  与实验密切相关. 计算过程中碰撞能分别取为 0.48, 0.77, 1.24 eV, 积分步长为 0.1 fs, 运行轨线为 50000 条; 在研究反应物不同振动态对该反应的影响时, 取碰撞能 0.48 eV, 反应物分子的振动和转动量子数分别取为  $v = 0-2$  和  $j = 0$ ; 表示矢量  $\mathbf{k}$  与矢量  $\mathbf{j}'$  的夹角  $\theta_{\text{r}}$  从  $0^\circ$  取到  $180^\circ$ ; 表示矢量  $\mathbf{k}$ 、矢量  $\mathbf{k}'$  和矢量  $\mathbf{j}'$  相关的  $\phi_{\text{r}}$  从  $0^\circ$  取到  $360^\circ$ .

## 3 计算结果与讨论

我们计算了三个不同的碰撞能下的反应概率和积分反应截面, 并与实验值进行了比较, 结果列于表 1.

表 1 不同碰撞能下的反应概率、积分反应截面及与实验值的比较

碰撞能/eV	$P$	$\sigma_{\text{r}}/\text{\AA}^2$	$\sigma_{\text{r}}(\text{实验值})/\text{\AA}^2$ <sup>[41]</sup>
0.48	0.629	33.225	$27 \pm 4.0$
0.77	0.481	22.862	$22.6 \pm 4.7$
1.24	0.377	14.490	$21.5 \pm 5.4$

由表 1 可以看出, 反应概率是随着碰撞能的增大而减小的, 积分截面的变化也如此, 表明低能下反应更容易进行. 这说明反应是一个特殊的吸热反应, 并且在低能时反应截面相对较大, 当碰撞能增加时, 反应截面迅速减小, 这与反应路径上有一个较深的势阱有关, 而且与楚天舒等<sup>[42]</sup> 在研究  $\text{D}^++\text{H}_2 \rightarrow \text{DH}+\text{H}^+$  反应的积分反应截面时所得到的结论是一致的. 本文计算出的积分反应截面与实验值符合较好, 并且与我们最近用量子方法所计算的截面结果<sup>[20]</sup> 趋势也是一致的. 这也进一步证明了本文势能面的精确性以及 QCT 方法具有较高的准确性.

矢量  $\mathbf{k}$  和矢量  $\mathbf{j}'$  之间的矢量关系用函数  $P(\theta_{\text{r}})$  分布描绘. 从图 1 中可以看出, 三个碰撞能对应的  $P(\theta_{\text{r}})$  分布在  $\theta_{\text{r}} = 90^\circ$  时都存在极大的峰值, 而且关于  $90^\circ$  呈轴对称分布. 在  $90^\circ$  处  $P(\theta_{\text{r}})$  分布有峰值, 说明产物转动角动量矢量  $\mathbf{j}'$  有比较强烈的取向分布, 此分布是在垂直于  $\mathbf{k}$  的方向上的, 并且随

着能量的增加,  $P(\theta_r)$  分布的峰值逐渐增高变窄, 说明取向效应逐渐增强, 增强的幅度比较明显. 从下面表 2 中产物转动取向参数  $\langle P_2(\cos(\theta_r)) \rangle$  也能看出随着碰撞能的增加, 取向效应逐渐增强.

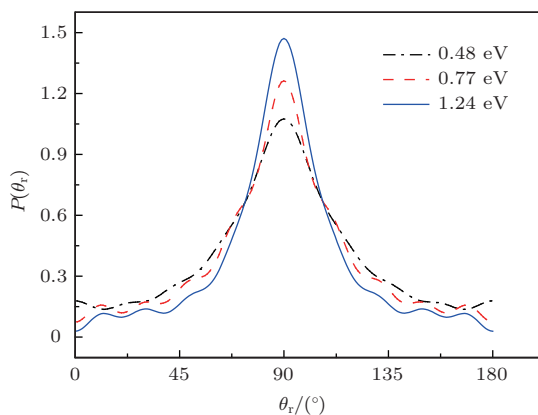


图 1 不同碰撞能下描述  $\mathbf{k}-\mathbf{j}'$  之间的关联  $P(\theta_r)$  分布

表 2 三个不同碰撞能下的取向参数值

碰撞能	0.48 eV	0.77 eV	1.24 eV
$\langle P_2(\mathbf{j}' \cdot \mathbf{k}) \rangle$	-0.45374	-0.46199	-0.47546

矢量  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{j}'$  之间的相关由函数  $P(\phi_r)$  分布描绘, 能够提供产物转动定向的动力学信息. 由图 2 可以看出,  $P(\phi_r)$  在  $\phi_r = 90^\circ$  和  $270^\circ$  都存在峰值, 但是关于散射平面  $\phi_r = 180^\circ$  并不对称, 这反映了产物的极化情况. 并且  $P(\phi_r)$  分布在  $\phi_r$  为  $90^\circ$  和  $270^\circ$  的峰值随着碰撞能的增加而逐渐增高, 说明产物转动角动量矢量  $\mathbf{j}'$  在质心系下取向是沿着  $y$  轴方向, 且取向效应变强. 另外三个碰撞能对应的  $P(\phi_r)$  分布在  $\phi_r = 270^\circ$  的峰值都小于  $\phi_r = 90^\circ$  的峰值, 说明产物  $\text{ArH}^+$  的转动角动量  $\mathbf{j}'$  定向于  $y$  轴正方向. 反应  $\text{Ar} + \text{H}_2^+$  的  $P(\phi_r)$  分布不对称, 引起了产物定向效应, 这应该是由反应物分子离子  $\text{H}_2^+$  的原子之间的排斥能产生的, 具体理论解释详见文献 [43]. 我们知道, 在化学键断裂与重新形成时,  $\mathbf{L} \sin^2 \beta + \mathbf{J} \cos^2 \beta$  项是对称的, 但是因为  $\mathbf{J}_1 m_B / m_{AB}$  排斥能的作用, 致使产物  $\text{ArH}^+$  的转动角动量出现定向效应.

$\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{j}'$  三矢量相关及产物的散射方向可用 PDDCS 描述, 从描述  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$  的图 3(a) 看出, 产物分子  $\text{ArH}^+$  主要呈现较强的前向散射和较弱的后向散射, 并且随着能量的增加, 前向散射明显增强, 而后向散射逐渐减弱.  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  是 Legendre 二阶展开的期望值  $\langle P_2(\cos(\theta_r)) \rangle$ ; 从图 3(b) 中容易看出,

$(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  的分布与  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$  的分布呈现相反的趋势, 说明产物分子  $\text{ArH}^+$  的角动量  $\mathbf{j}'$  趋于垂直于反应物的相对速度  $\mathbf{k}$  方向极化. 由图还可以看出, 对于微分反应截面  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  的分布, 在  $\theta_t < 45^\circ$  时, 反应的极化分布随能量的改变表现出明显的差异, 且随着能量的增大而极化增强; 当  $\theta_t > 45^\circ$  时, 三个反应的极化趋势基本是一致的. 图 3(c) 和 (d) 描述了对于  $q \neq 0$  的截面  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$  和  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$  分布. 如果  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$  的值为负值是表示产物取向于  $y$  轴, 若为正值是表示产物取向于  $x$  轴, 并且它的绝对值越大, 反映出沿着对应轴的取向效应就越强烈. 由图 3(c) 中可以看出, 当碰撞能为 0.48 eV 和 0.77 eV 时  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$  的值为负, 预示着产物转动取向于  $y$  轴, 而且  $\theta_t = 30^\circ$  时, 在三个碰撞能下反应的取向效应都较强烈, 并且随着碰撞能的增加, 取向效应在该角度下越来越明显.  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$  分布如图 3(d) 所示, 其值在不同碰撞能有正有负, 表明产物既取向于  $y$  轴也取向于  $x$  轴, 当碰撞能分别为 0.48, 0.77, 1.24 eV 时,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$  分布分别在  $36^\circ$ ,  $23^\circ$ ,  $21^\circ$  处极化最强烈, 且取向于  $y$  轴. 通过以上分析可知, 极化微分反应截面对于碰撞能的变化是非常敏感的.

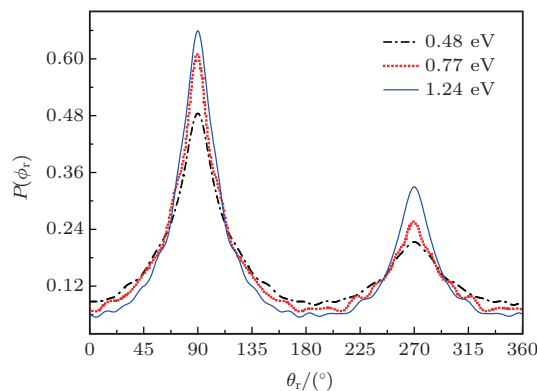


图 2 三个不同碰撞能下描述  $\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{j}'$  之间的关联  $P(\theta_r)$  分布

此外, 我们还计算了碰撞能为 0.48 eV, 振动量子数分别为  $v = 0, 1, 2$  时反应概率以及积分反应截面, 如表 3 所示. 结果显示在碰撞能相同时, 随着振动能的增大, 相应的反应概率和积分反应截面是逐渐减小的, 说明了反应物分子的振动能对该反应有削弱作用. 通过对积分反应截面的理论计算值和实验结果比较发现, 二者符合较好, 这也进一步验证了势能面本身的精确性.

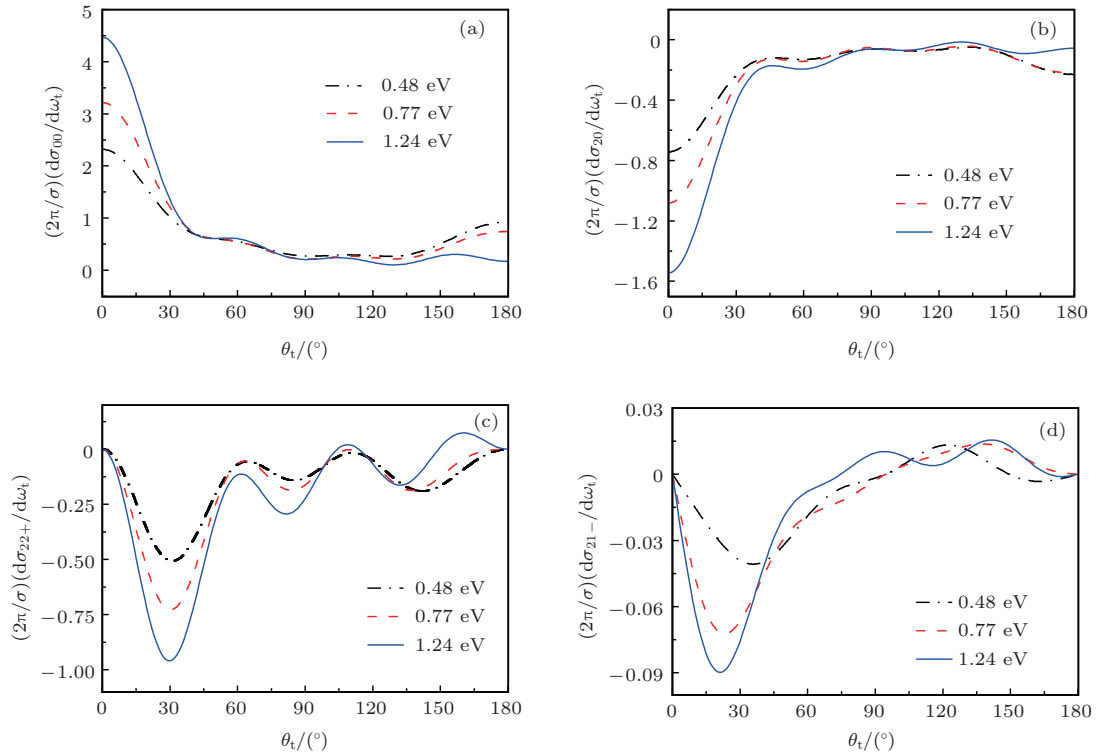


图3 三个碰撞能时反应的四个极化微分反应截面 (a) (0,0); (b) (2,0); (c) (2,2+); (d) (2,1-)

表3 不同振动态的反应概率、积分反应截面以及与其实验值的比较

振动量子数	$v = 0$	$v = 1$	$v = 2$
$P$	0.629	0.56250	0.51996
$\sigma_r/\text{\AA}^2$	33.225	31.17245	30.20346
$\sigma_r/\text{\AA}^2$ [41](实验值)	$27 \pm 4.0$	$34.0 \pm 4.0$	$21.3 \pm 4.0$

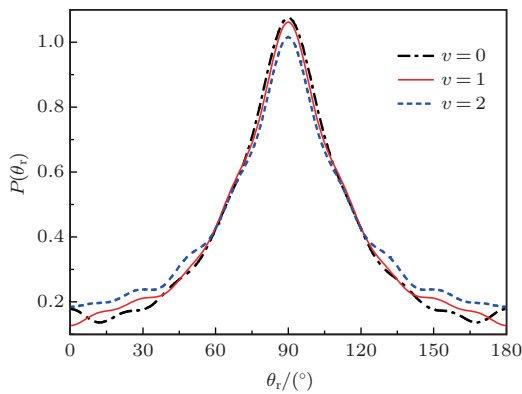


图4 不同振动态的  $P(\theta_r)$  分布

不同振动态的  $\mathbf{k}\text{-}\mathbf{j}'$  相关函数  $P(\theta_r)$  分布如图4所示. 由图可以看出, 在  $\theta_r = 90^\circ$  时,  $P(\theta_r)$  分布关于  $90^\circ$  呈现轴对称分布, 并且有一个极大

值, 表明  $\mathbf{j}'$  在垂直于  $\mathbf{k}$  的方向上有强烈的取向效应. 而且随反应物振动量子数的逐步增加,  $P(\theta_r)$  在  $\theta_r = 90^\circ$  的峰值在逐渐减小, 矢量  $\mathbf{j}'$  的取向效应变弱减小了  $\mathbf{j}'$  的各向异性分布.

为获得更全面的立体动力学信息, 图5给出了不同初始振动态的四个极化微分反应截面. 从图中可以看出,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$  呈现出较为明显的前向散射以及弱后向散射, 并且随反应物振动能的增大, 前向散射效应是减弱的, 而后向散射基本不变.  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  分布与  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$  的分布趋势是相反的, 表明矢量  $\mathbf{j}'$  关于  $\mathbf{k}$  具有垂直取向.  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  的绝对值减小, 说明随着碰撞能的增加取向效应减弱. 对  $q \neq 0$  的PDDC-Ss,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{22+}/d\omega_t)$  的值与  $\langle \sin^2 \theta_r \cos 2\phi_r \rangle$  有关, 从图5(c)中可以看出, 产物转动均取向于  $y$  轴, 并且在  $\theta_t = 30^\circ$  时, 三个振动能级取向效应最强烈, 随着振动能级的变化,  $v = 1$  时取向效应最明显. 从图5(d)中可以看出, 在三个振动能级下,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$  值有正有负, 表明产物既取向于  $y$  轴也取向于  $x$  轴, 当振动量子数分别为  $v = 0, 1, 2$  时,  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{21-}/d\omega_t)$  分布分别在  $36^\circ, 24^\circ, 26^\circ$  处极化最强烈, 且取向于  $y$  轴.

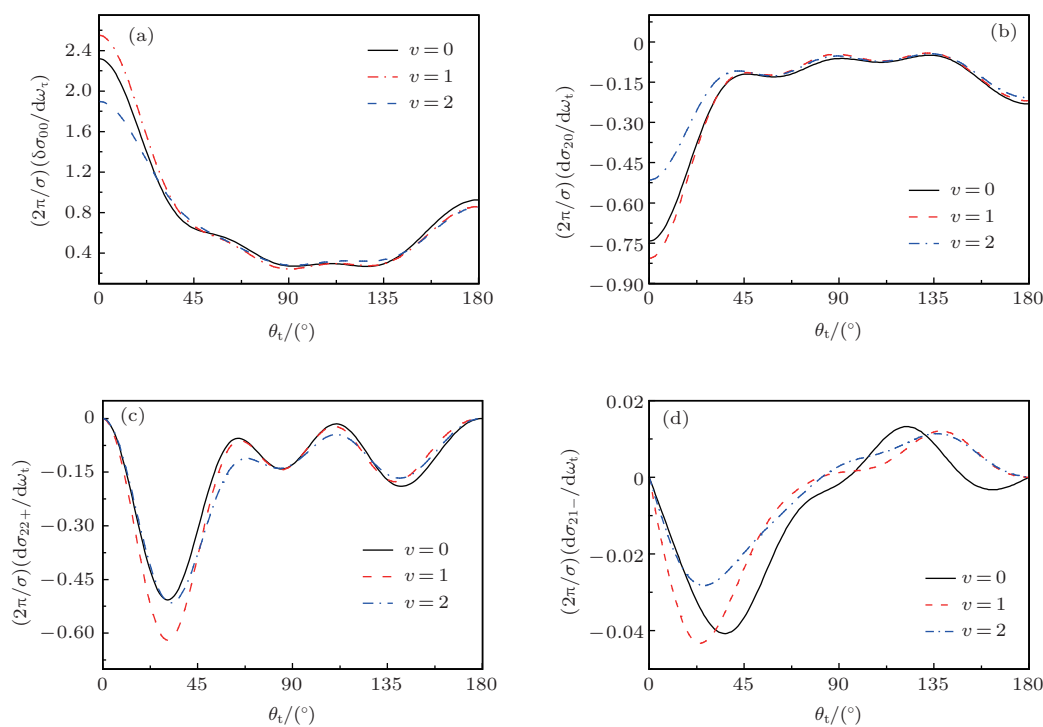


图5 极化微分反应截面 (a) (0,0); (b) (2,0); (c) (2,2+); (d) (2,1-)

## 4 结 论

本文基于我们新构建的基态精确势能面, 在碰撞能为分别为 0.48, 0.77, 1.24 eV 时, 运用准经典轨线方法, 研究了碰撞能对反应  $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H}$  的立体动力学性质的影响. 在不同碰撞能及反应物振动态下计算得到的积分反应截面与实验值符合较好, 这也源于我们所使用的较为精确的新势能面.  $P(\theta_r)$  分布的结果表明了在不同碰撞能以及不同振动态的条件下, 产物转动角动量  $j'$  都在垂直于反应物相对速度矢量  $\mathbf{k}$  的方向上有较为强烈的取向, 但是受振动激发的影响要小于碰撞能对其的影响. 描述  $\mathbf{k}-\mathbf{k}'-j'$  三矢量相关的  $P(\phi_r)$  分布函数在不同碰撞能下取向都沿着  $y$  轴方向, 并且随能量的增加取向效应变强. 在不同碰撞能及振动态下计算出的极化微分反应截面结果表明, 碰撞能和振动激发对此反应具有较大的影响, 并且  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_t)$  和  $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_t)$  在不同条件下均呈现出较强的前向散射和较弱的后向散射.

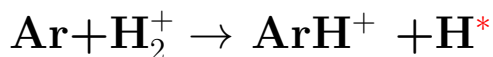
## 参考文献

[1] Jorfi M, Honvault P 2011 *J. Phys. Chem. A* **115** 8791  
 [2] Campbell F M, Browning R, Latimer C J 1980 *J. Phys. B* **13** 4257

[3] Latimer C J, Campbell F M 1982 *J. Phys. B* **15** 1765  
 [4] Bilotta R M, Preuninger F N, Farrar J M 1980 *J. Chem. Phys.* **73** 1637  
 [5] Bilotta R M, Preuninger F N, Farrar J M 1980 *Chem. Phys. Lett.* **74** 95  
 [6] Bilotta R M, Farrar J M 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1699  
 [7] Houle F A, Anderson S L, Gerlich D, Turner T, Lee Y T 1982 *J. Chem. Phys.* **77** 748  
 [8] Houle F A, Anderson S L, Gerlich D, Turner T, Lee Y T 1981 *Chem. Phys. Lett.* **82** 392  
 [9] Liao C L, Xu R, Flesch G D, Bear M, Ng C Y 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 4818  
 [10] Liao C L, Liao C X, Ng C Y 1985 *J. Chem. Phys.* **82** 5489  
 [11] Liao C L, Xu R, Shao G D, Nourbakhsh S, Flesch G D, Baer M, Ng C Y 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 4832  
 [12] Ng C Y 1992 *Adv. Chem. Phys.* **82** 401  
 [13] Dressler R A, Chiu Y, Levandier D J, Tang X N, Hou Y, Chang C, Houchins C, Xu H, Ng C Y 2006 *J. Chem. Phys.* **125** 132306  
 [14] Qian X, Zhang T, Chiu Y, Levandier D J, Miller J S, Dressler R A, Ng C Y 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 2455  
 [15] Kuntz P J, Roach A C 1972 *J. Chem. Soc.* **68** 259  
 [16] Bear M, Beswick J A 1979 *Phys. Rev. A* **19** 1559  
 [17] Chapman S 1985 *J. Chem. Phys.* **82** 4033  
 [18] Aguilon F, Sizun M 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 9551  
 [19] Liu X G, Liu H R, Zhang Q G 2011 *Chem. Phys. Lett.* **507** 24  
 [20] Hu M, Xu W W, Liu X G, Tan R S, Li H Z 2013 *J. Chem. Phys.* **138** 174305-1  
 [21] Liu X G, Sun H Z, Liu H R, Zhang Q G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 779 (in Chinese) [刘新国, 孙海竹, 刘会荣, 张庆刚 2010 物理学报 **59** 779]

- [22] Xiao J, Yang C L, Wang M S 2012 *Chin. Phys. B* **21** 043101
- [23] Liu Y F, He X H, Shi D H, Sun J F 2011 *Chin. Phys. B* **20** 078201
- [24] Kong H, Liu X G, Xu W W, Liang J J, Zhang Q G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6926 (in Chinese)[孔浩, 刘新国, 许文武, 梁景娟, 张庆刚 2009 物理学报 **58** 6926]
- [25] Zhang W Q, Cong S L, Zhang C H, Xu X S, Chen M D 2009 *J. Phys. Chem. A* **113** 4192
- [26] Zhang W Q, Li Y Z, Xu X S, Chen M D 2010 *Chem. Phys.* **367** 115
- [27] Duan L H, Zhang W Q, Xu X S, Cong S L, Chen M D 2009 *Mol. Phys.* **107** 2579
- [28] Zhang C H, Zhang W Q, Chen M D 2009 *J. Theor. Comput. Chem.* **8** 403
- [29] Aguado A, Paniagua M 1992 *J. Chem. Phys.* **96** 1265
- [30] Aguado A, Tablero C, Paniagua M 1998 *Comp. Phys. Commun.* **108** 259
- [31] Li W L, Wang M S, Yang C L, Liu W W, Sun C, Ren T Q 2007 *Chem. Phys.* **337** 93
- [32] Aoiz F J, Brouard M, Enriquez P A 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 4964
- [33] Chen M D, Han K L, Lou N Q 2002 *Chem. Phys.* **283** 463
- [34] Ma J J, Chen M D, Cong S L, Han K L 2006 *Chem. Phys.* **327** 529
- [35] Chen M D, Han K L, Lou N Q 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 4463
- [36] Wang M L, Han K L, He G Z 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 5446
- [37] Aoiz F J, Brouard M, Enriquez P A 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 4964
- [38] Han K L, He G Z, Lou N Q 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 8699
- [39] Zhang X, Han K L 2006 *Int. Quantum Chem.* **106** 1815
- [40] Chu T S, Zhang Y, Han K L 2006 *Int. Rev. Phys. Chem.* **25** 201
- [41] Liao C L, Xu R, Flesch G D, Baer M, Ng C Y 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 4822
- [42] Chu T S, Han K L 2008 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 2438
- [43] Han K L, He G Z, Lou N Q 1989 *Chin. J. Chem. Phys.* **2** 323

## Influence of collision energy and reagent vibrational excitation on the stereodynamics of reaction



Hu Mei   Liu Xin-Guo<sup>†</sup>   Tan Rui-Shan

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

( Received 25 September 2013; revised manuscript received 22 October 2013 )

### Abstract

The quasi-classical trajectory is calculated for the reaction  $\text{Ar} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H} (1^2A')$  on the latest potential surface. The correlated integral reaction cross section,  $P(\theta_r)$ ,  $P(\phi_r)$  distribution and the polarization dependent differential cross sections polarization dependent differential cross sections (PDDCSs) are discussed in detail. The results show that the integral reaction cross sections are well consistent with the experimental values at different collision energies and reagent vibrational excitations which indicates that our potential energy surface is accurate. The results indicate that the vibration excitation has less influence on the  $P(\theta_r)$  distribution than the collision energy. The  $P(\phi_r)$  distribution, and PDDCS are quite sensitive to collision energy and reagent vibrational excitation.

**Keywords:** quasi-classical trajectory method, integral reaction cross section, vector correlation, polarization dependent differential cross section

**PACS:** 34.50.Lf, 87.15.H-, 34.50.-s

**DOI:** 10.7498/aps.63.023402

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274205).

† Corresponding author. E-mail: liuxinguo@sdmu.edu.cn