

文章编号:1673-5005(2013)01-0190-05

doi:10.3969/j.issn.1673-5005.2013.01.033

反应物分子初始振动激发对 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 立体动力学性质的影响

郭雅慧, 路 斌, 张凤昀, 舒仕爽, 马红章

(中国石油大学 理学院, 山东 青岛 266580)

摘要:在高精度从头计算 DMBE 势能面上运用准经典轨线方法讨论反应物分子初始振动激发对 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应的立体动力学性质的影响,同时对反应几率、反应截面进行研究。结果表明:产物的转动角动量 $\mathbf{j}'$ 在垂直于反应物相对速度矢量 $\mathbf{k}$ 的方向上的排列取向程度在高振动态时随着初始反应物振动量子数的增加而减小;二面角分布函数 $P(\varphi_r)$ 显示产物的转动角动量,有比较强的定向效应,随着初始振动量子数的增加呈现出减小的趋势;反应物分子的初始振动激发对产物分子的转动排列取向效应和定向效应等立体动力学性质产生很大影响。

关键词:分子反应动力学;准经典轨线方法;矢量相关;振动量子数

中图分类号:O 643; O 641 **文献标志码:**A

Effect of reagent vibrational excitation on stereodynamical properties of $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ reaction

GUO Ya-hui, LU Bin, ZHANG Feng-yun, SHU Shi-shuang, MA Hong-zhang

(College of Science in China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

Abstract: The effect of reagent vibrational excitation on the stereodynamical properties of $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ reaction was investigated by quasi-classical trajectory (QCT) method on the highly accurate $^4\text{A}''$ double many-body expansion (DMBE) potential energy surface (PES). And the reaction probability and the reaction cross-section were also studied. The results show that the alignment of the product rotational angular momentum $\mathbf{j}'$ along the perpendicular direction to relative velocity vector $\mathbf{k}$ decreases with the vibrational quantum number increasing. The dihedral angle distribution function $P(\varphi_r)$ shows the rotational angular momentum of the product and has relatively strong orientation effect, which decreases with initial vibrational quantum number increasing. The vibrational excitation of the reagent has a considerable influence on the stereodynamical properties of alignment effect and orientation effect of product rotational angular momentum.

Key words: molecular reaction dynamics; quasi-classical trajectory method; vector correlation; vibrational quantum number

氢分子与基态氮原子的反应 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 及其逆反应在含氮燃料的燃烧过程和大气化学中起着非常重要的作用,人们对该反应的反应能垒、活化能、速率常数等性质进行了深入研究^[1-4]。Poveda 等^[5]第一次基于从头算(ab initio)方法构建了 NH_2 的 $^4\text{A}''$ 态的全域势能面。利用这一势能面计算得到的反应势垒高度为 125.1 kJ mol,与试验值符合得很好。然而,这些理论研究多是给出 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应标量的性质,而得到反应的矢量性质对

动力学研究也是关键的^[6-7]。经典轨线作为研究反应体系矢量相关的一种非常可靠的方法,多年来得到了广泛的应用^[8-18]。Han 等^[19]利用经典轨线方法和量子力学方法研究了该反应在 200 ~ 2500 K 温度范围的速率常数,与试验结果符合非常好;Zhang 等^[20]研究了 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2(v=0, j=0) \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 及其同位素 D_2 、 HD 取代效应对该反应立体动力学的影响。笔者利用此方法研究 H_2 分子的振动激发($v=0, 1, 3, 5, j=0$)对反应矢量相关性的影响。

收稿日期:2012-02-10

基金项目:国家自然科学基金项目(41201336;41001250);国家海洋局海洋遥测工程技术研究中心开放基金项目(2012002)

作者简介:郭雅慧(1982-),女,讲师,博士,主要从事分子反应动力学、激光与物质相互作用的实验和理论研究。E-mail: yhgao@upc.edu.cn。

1 计算理论与方法

1.1 产物分子角动量的转动极化

计算过程中采用质心坐标系描述反应物相对速度 $\boldsymbol{k}$ 和产物相对速度 $\boldsymbol{k}'$ 的分布,见图 1; $\boldsymbol{k}$ 平行于 z 轴, y 轴垂直于含有 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}'$ 的 xz 平面,产物转动角动量 $\boldsymbol{j}'$ 的极角和方位角分别用 θ_r 和 φ_r 表示。

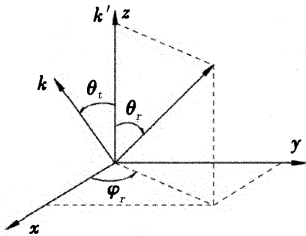


图 1 描述 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{j}'$ 分布的质心坐标系

Fig.1 Center-of-mass frame utilized to represent $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ and $\boldsymbol{j}'$ relationship

描述反应物相对速度 $\boldsymbol{k}$ 和产物转动角动量 $\boldsymbol{j}'$ 两矢量相关的函数 $P(\theta_r)$ 的分布^[21] 可以展开为

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

其中展开系数

$$a_0^{(k)} = \int_0^\pi P(\theta_r) P_k(\cos \theta_r) \sin \theta_r d\theta_r = \langle P_k(\cos \theta_r) \rangle$$

又称为极化参数,当 k 为奇数时称为定向系数, k 为偶数时称为取向系数。描述 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{j}'$ 三矢量相关的函数 $P(\varphi_r)$ 分布可以用傅里叶级数展开

$$P(\varphi_r) = \frac{1}{2\pi} \left(1 + \sum_{\text{even}, n \geq 2} a_n \cos(n\varphi_r) + \sum_{\text{odd}, n \geq 1} b_n \sin(n\varphi_r) \right),$$

其中, $a_n = 2 \langle \cos(n\varphi_r) \rangle$, $b_n = 2 \langle \sin(n\varphi_r) \rangle$ 。

在质心坐标系下,产物转动角动量 $\boldsymbol{j}'$ 的空间分布可展开为

$$P(\theta_r, \varphi_r) = \frac{1}{4\pi} \sum_k \sum_{q \geq 0} [a_{q\pm}^k \cos(q\varphi_r) - a_{q\mp}^k \sin(q\varphi_r)] C_{kq}(\theta_r, 0).$$

$$a_{q\pm}^k = \begin{cases} 2 \langle C_{klql}(\theta_r, 0) \cos(q\varphi_r) \rangle, & k \text{ 为偶数;} \\ 2i \langle C_{klql}(\theta_r, 0) \cos(q\varphi_r) \rangle, & k \text{ 为奇数.} \end{cases}$$

其中, $C_{kq}(\theta_r, \varphi_r)$ 为修正的球谐函数。计算时 $P(\theta_r, \varphi_r)$ 展开到 $k = 7$ 就可得到较好的收敛结果。

联系 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{j}'$ 三矢量的角分布函数可以写为

$$P(\omega_t, \omega_r) = \sum_{kq} \frac{[k]}{4\pi} \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma_{kq}}{d\omega_t} C_{kq}(\theta_r, \varphi_r)^*.$$

式中, $[k] = 2k + 1$; σ 为积分反应截面; $C_{kq}(\theta_r, \varphi_r)$ 为修正的球谐函数; $(1/\sigma) (d\sigma_{kq}/d\omega_t)$ 为广义极化微分反应截面(PDDCSs, 记为 D), PDDCSs 可以通过以下公式计算得到:

$$D_{kq\pm} = \frac{2\pi}{\sigma} \frac{d\sigma_{kq\pm}}{d\omega_t} = \sum_{k_1} \frac{2\pi[k_1]}{4\pi} S_{kq\pm}^{k_1} C_{k_1q}(\theta_t, 0).$$

其中, $S_{kq\pm}^{k_1} = \langle C_{k_1q}(\theta_t, 0) C_{kq}(\theta_r, 0) [(-1)^q e^{iq\varphi_r} \pm e^{-iq\varphi_r}] \rangle$, 尖括号表示对所有角度求平均。描述产物角分布的 D_{00} 为

$$\frac{2\pi}{\sigma} \frac{d\sigma_{00}}{d\omega_t} = P(\omega_t) = \sum_{k_1} \frac{2\pi[k_1]}{4\pi} h_0^{k_1}(k_1, 0) P_{k_1}(\cos \theta_t),$$

其中, $h_0^{k_1}(k_1, 0) = S_{00}^{k_1} = \langle P_k(\cos \theta_t) \rangle$ 。

当 $q = 0$ 时,

$$\frac{2\pi}{\sigma} \frac{d\sigma_{k0}}{d\omega_t} = \sum_{k_1} \frac{2\pi[k_1]}{4\pi} S_{k0}^{k_1} P_{k_1}(\cos \theta_t).$$

其中, $S_{k0}^{k_1} = \langle P_{k_1}(\cos \theta_t) P_k(\cos \theta_r) \rangle$ 。在很多光诱导的双分子反应试验中,研究人员只对 $k = 0$ 和 $k = 2$ 这些极化分量感兴趣,本文中计算 $(2\pi/\sigma) (d\sigma_{00}/d\omega_t)$ 和 $(2\pi/\sigma) (d\sigma_{20}/d\omega_t)$ 。

1.2 势能面

采用 Poveda 和 Varandas 用双多体项展开方法构建的全维势能面^[5]。在势能面构建过程中,选取了 1812 个数据点进行 ab initio 单点能计算。所采用的是满价全活化空间(FVCAS)方法和基于 FVCAS 的多参考组态相互作用方法(MRCI),所用的基组 aug-cc-Pv5Z, 7 个相关电子分布在 6 个活化轨道上($5a' + 1a''$),总共有 50 个组态方程。其中, $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2$ 反应在电子态 $^4A''$ 上的过渡态是直线构型。势垒位于 $R_{\text{N-H}} = 1.121 \text{ \AA}$, $R_{\text{H-H}} = 1.168 \text{ \AA}$ 处,高度为 125.1 kJ/mol。

1.3 准经典轨线计算

在 DMBE 势能面上,采用准经典轨线(QCT)方法。计算时,反应物分子振动、转动量子数分别为 $v = 0, 1, 3, 5$ 和 $j = 0$, 碰撞能为 313.8 kJ/mol, 积分步长取 0.1 fs, 总轨线条数取为 10000; N 原子和 H_2 分子质心间的初始距离取为 15 Å; 反应的最大碰撞参数 b_{max} 的确定方法为: 选择运行轨线 3000 条, 初步确定 b_{max} 的范围, 然后采用 10000 条轨线逐步增大 b 的数值直到反应轨线数值不再增加^[22]。4 个反应的 b_{max} 分别为 1.35、1.64、2.03、2.37 Å。

2 结果分析

图 2 为 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 的反应几率随初始振动激发的变化情况($v = 0, 1, 3, 5, j = 0$)。从图中可看出, $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2$ 发生正碰的反应几率在 $v = 1$ 时最大。该反应的反应截面随初始振动激发的变化情况如图 3 所示。可以看出, 反应截面随着振动量子数的增大而显著增大, 当反应物 H_2 由 $v = 0$ 激发到

$v = 5$ 能级时,反应截面由 $1.65 \text{ \AA}^2$ 增大到 $6.04 \text{ \AA}^2$ 。Yu 等^[23] 研究发现,当初始碰撞能由 83.68 kJ/mol 增加到 585.8 kJ/mol 时,反应截面仅仅增大到 $1.80 \text{ \AA}^2$ 。由此可以看出,对于 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 这样一个典型的吸热反应来讲,反应物的初始振动激发比平动激发更有利于反应的进行。对于吸热反应 $\text{He} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$,也曾观测到类似的现象^[24]。

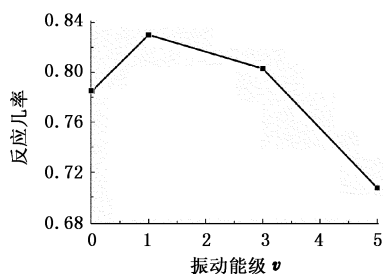


图2 反应几率

Fig. 2 Reaction probability

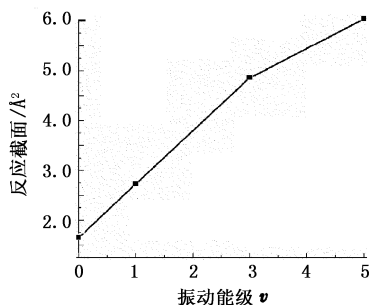


图3 反应截面

Fig. 3 Integral reaction cross section

图4描述的是 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应产物分子 NH 的 $\mathbf{k} - \mathbf{j}'$ 两矢量相关函数 $P(\theta_r)$ 的分布情况。由图4知,函数 $P(\theta_r)$ 在 $\theta_r = 90^\circ$ 处有一个显著的峰,并且关于 $\theta_r = 90^\circ$ 呈轴对称分布,这表明矢量

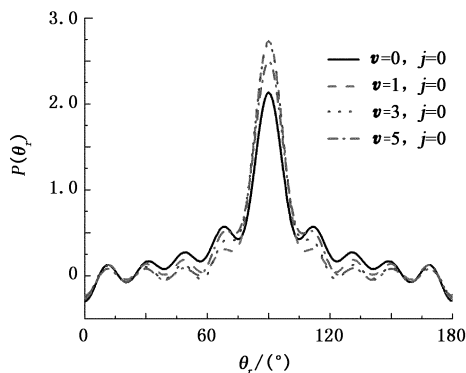


图4 $\mathbf{k} - \mathbf{j}'$ 两矢量相关的 $P(\theta_r)$ 分布

Fig. 4 $P(\theta_r)$ distribution describing $\mathbf{k} - \mathbf{j}'$ correlation

$\mathbf{j}'$ 的取向分布倾向于在垂直于矢量 $\mathbf{k}$ 的方向上。当反应物 H_2 分子被激发到较高振动态上时, $P(\theta_r)$ 的

峰值变大,宽度基本未变化,这说明相比于振动基态,当 H_2 分子处于高振动态时取向效应大大增强。反应物分子处于振动激发态,随着初始反应物振动量子数的增加,取向效应反而有所减小。质心坐标系中的产物转动取向参数 $\langle P_2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}') \rangle$ 可以描述产物转动极化程度, H_2 分子位于三个高振动态时的 $\langle P_2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}') \rangle$ 数值分别为 -0.356 、 -0.405 和 -0.426 ,变化趋势与 $P(\theta_r)$ 的分布是一致的。

图5为 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应的 $\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{j}'$ 三矢量相关函数 $P(\varphi_r)$ 的分布。可以看出, $P(\varphi_r)$ 关于 $\varphi_r = 90^\circ$ 不是对称分布,这种分布不对称反映了产物转动角动量的强烈极化。 $P(\varphi_r)$ 峰值主要出现在 $\varphi_r = 270^\circ$ 处表明在质心坐标系中产物的转动角动量矢量主要沿 y 轴取向,而且定向于 y 轴的负方向。 $P(\varphi_r)$ 在 $\varphi_r = 270^\circ$ 的尖峰表明反应主要由平面内机理控制,产物分子 NH 在平行于散射平面的平面内沿顺时针方向转动。当反应物分子被激发到较高的振动态时, $P(\varphi_r)$ 在 $\varphi_r = 270^\circ$ 的峰逐渐变矮变宽,说明产物分子 NH 的转动排列定向效应随着反应物的振动激发而减弱。由此推断, $P(\varphi_r)$ 的分布敏感的依赖于反应物的初始振动量子数。值得注意的是, $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应关于 $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ 散射平面对称分布,但 $P(\varphi_r)$ 的分布却不对称,这可由瞬时碰撞模型^[25] 解释。

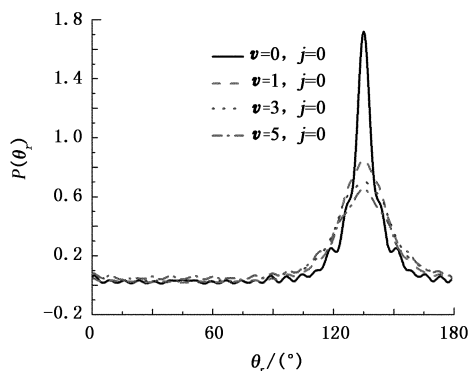


图5 角动量矢量 $\mathbf{j}'$ 相对于 $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ 平面的 $P(\varphi_r)$ 分布

Fig. 5 $P(\varphi_r)$ distribution with respect to $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ plane at different vibrational state

为了获得更加直观的关于产物转动角动量的转动极化分布,计算该反应的产物转动角动量 $\mathbf{j}'$ 的空间分布函数 $P(\theta_r, \varphi_r)$ ^[7],它是整个 $P(\omega_i, \omega_r)$ 分布对散射角的平均,如图6所示。从图中可以看出, $P(\theta_r, \varphi_r)$ 函数在 $\theta_r = 90^\circ$ 、 $\varphi_r = 270^\circ$ 处有一个峰,这与前面讨论的 $P(\theta_r)$ 和 $P(\varphi_r)$ 的分布是一致的。这进一步说明,产物的转动角动量沿着垂直于散射截

面的方向极化,而且产物分子主要是在平行于散射平面的平面内顺时针转动。

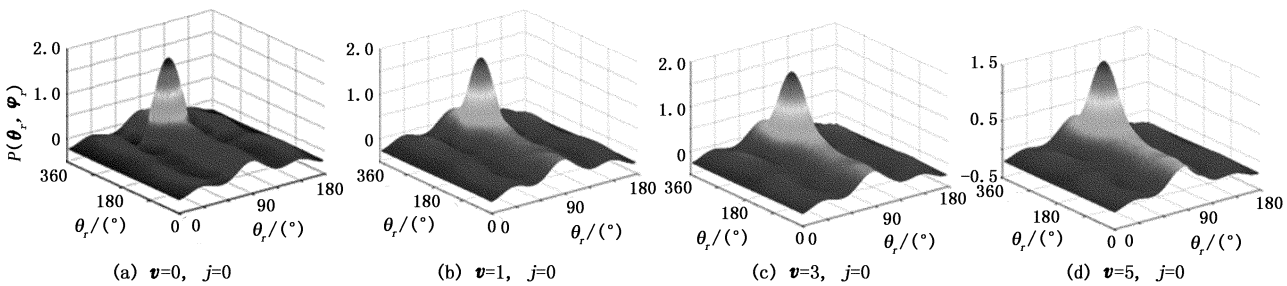


图 6 散射角平均下的 $P(\theta_r, \varphi_r)$ 分布

Fig. 6 Polar plots of $P(\theta_r, \varphi_r)$ distribution averaged over all scattering angles

图 7 为该反应的极化微分散射截面 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$,描述了产物分子的散射方向,与矢量 $\mathbf{j}'$ 的定向和取向均无关。可以看出,初始振动激发对微分散射截面 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$ 的分布影响很大, $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2$ 反应在低振动激发态($v = 0$)时表现为强烈的后向散射,随着振动量子数的增大,后向散射强

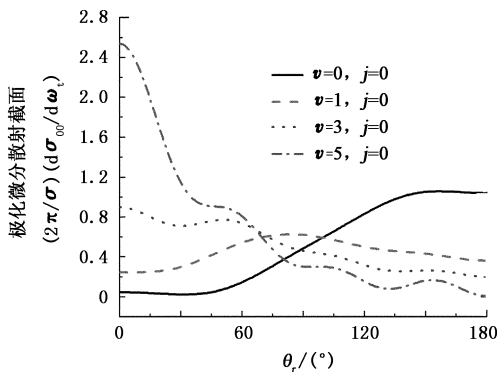


图 7 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$ 的分布

Fig. 7 Distribution of $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$

度减弱,逐步变为侧向散射($v = 1$),到高振动态($v = 3, 5$)时,侧向和后向散射强度进一步减弱,前向散射强度增加显著。图 8 给出了极化微分散射截面

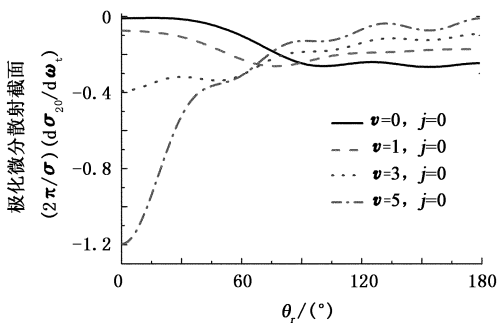


图 8 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$ 的分布

Fig. 8 Distribution of $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$

$(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$ 的角分布情况,可以看出,在整个散射角范围内, $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$ 呈现出与

$(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$ 分布相反的趋势,这表明 $\langle P_2(\cos \theta_r) \rangle$ 的期望值是负的,说明产物的转动角动量 $\mathbf{j}'$ 沿垂直于反应物相对速度方向取向。

3 结束语

采用准经典轨线的方法,应用 DMBE 势能面计算碰撞能在 313.8 kJ/mol 时,初始振动激发效应对 $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 的反应几率、反应截面、反应物相对速度矢量 $\mathbf{k}$ 和产物转动角动量矢量 $\mathbf{j}'$ 两矢量的相关函数 $P(\theta_r)$ 、 $\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{j}'$ 三矢量的相关函数 $P(\varphi_r)$ 以及极化微分散射截面 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$ 、 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$ 的影响。结果表明,随着反应物初始振动量子数的增大,反应截面显著增加,反应几率在第一个振动激发态达到最大,反应的取向效应先增强后减弱,定向效应减弱。极化微分散射截面 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{00}/d\omega_i)$ 、 $(2\pi/\sigma)(d\sigma_{20}/d\omega_i)$ 也随着振动量子数的增加显著变化。由此可见, $\text{N}(^4\text{S}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$ 反应的立体动力学性质敏感的依赖于反应物初始振动量子数。

致谢 感谢中国科学院大连化学物理研究所韩克利研究员的支持。

参考文献:

[1] KOSHI M, YOSHIMURA M, FUKUDA K, et al. Reactions of $\text{N}(^4\text{S})$ atoms with NO and H_2 [J]. J Chem Phys, 1990, 93(12): 8703-8708.
[2] DAVIDSON D F, HANSON R K. High temperature reaction rate coefficients derived from N-atom ARAS measurements and excimer photolysis of NO [J]. Int J Chem Kinet, 1990, 22(8): 843-861.
[3] ZHANG S W, TRUONG T N. Direct ab initio dynamics studies of $\text{N} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{NH} + \text{H}$ reaction [J]. J Chem Phys, 2000, 113(15): 6149-6153.
[4] PASCUAL R Z, SCHATZ G C, LENDVAY G, et al.

- Quasiclassical trajectory and transition state theory studies of the $N(^4S) + H_2 \leftrightarrow NH(X^3\Sigma^-) + H$ reaction [J]. *J Phys Chem A*, 2002, 106(16): 4125-4136.
- [5] POVEDA L A, VARANDAS A J C. Repulsive double many-body expansion potential energy surface for the reactions $N(^4S) + H_2$ reversible arrow $NH(X^3\Sigma^-) + H$ from accurate ab initio calculations [J]. *Phys Chem*, 2005, 7(15): 2867-2873.
- [6] AOIZ F J, BROUARD M, ENRIQUEZ P A. Product rotational polarization in photon-initiated bimolecular reactions [J]. *J Chem Phys*, 1996, 105(12): 4964-4982.
- [7] CHU T S. Quantum mechanics and quasiclassical study of the $H/D + FO \rightarrow OH/OD + F$, $HF/DF + O$ reactions; chemical stereodynamics [J]. *J Comput Chem*, 2009, 31(7): 1385-1396.
- [8] CHEN M D, TANG B Y, HAN K L, et al. Quasi-classical trajectory study of the DCl/HCl product branching ratios for the $Cl + HD$ reaction on BW2 potential energy surface [J]. *Chem Phys Lett*, 2001, 337(4-6): 349-354.
- [9] WANG M L, HAN K L, HE G Z. Product rotational polarization in photo-initiated bimolecular reactions $A + BC$; dependence on the character of the potential energy surface for different mass combinations [J]. *J Phys Chem A*, 1998, 102(50): 10204-10210.
- [10] LI W L, WANG M S, YANG C L, et al. Quasi-classical trajectory study of the cross sections of the reactions of $D^- + H_2 \rightarrow H^- + HD$ and $H^- + D_2 \rightarrow D^- + HD$ [J]. *Chem Phys Lett*, 2007, 445(4-6): 125-128.
- [11] XU W W, LIU X G, LUAN S X, et al. Theoretical study of the stereodynamics of the reactions of $He + H_2^+ / HD^+$ [J]. *Chem Phys*, 2009, 355(1): 21-24.
- [12] 孙海竹, 刘新国, 刘会荣. 反应物振动激发对反应 $O^+ + DH(v=0, 1, 2, 3, j=0) \rightarrow OD^+ + H$ 影响的准经典轨线研究 [J]. *化学学报*, 2011, 69(9): 1075-1080.
SUN Hai-zhu, LIU Xin-guo, LIU Hui-rong. Effect of reagent vibrational excitation on the reaction of $O^+ + DH(v=0, 1, 2, 3, j=0) \rightarrow OD^+ + H$: a quasi-classical trajectory stude [J]. *Acta Chem Sinica*, 2011, 69(9): 1075-1080.
- [13] MENG Q T, ZHAO J, XU Y, et al. Theoretical study of the stereo-dynamics of the reaction $H + FO \rightarrow OH + F$ [J]. *Chem Phys*, 2009, 362(1-2): 65-70.
- [14] ZHAO J, XU Y, MENG Q T. Isotope effect of the stereodynamics for the reactions $F + HO \rightarrow HF + O$ and $F + DO \rightarrow DF + O$ [J]. *J Phys B-At Mol Opt Phys*, 2009, 42(16): 165006(1-6).
- [15] ZHU T, HU G D, ZHANG Q G. Quasi-classical trajectory study of the reaction $O(^3P) + HCl \rightarrow OH + Cl$ and $O(^3P) + DCl \rightarrow OD + Cl$: vector and scalar properties [J]. *J Mol Struct-THEOCHEM*, 2010, 948(1-3): 36-42.
- [16] KANG L H, ZHU M Y. Quasi-classical trajectory study of the CD/CH product branching ratios for the $C(^1D) + HD$ reaction [J]. *J Mol Struct-THEOCHEM*, 2010, 945(1-3): 116-119.
- [17] YUE X F, ZHANG Y Q, FENG H R, et al. Quasi-classical trajectory study of the $N(^2D) + H_2 \rightarrow NH + H$ and $N(^2D) + D_2 \rightarrow ND + D$ reactions; vector correlation [J]. *J Mol Struct-THEOCHEM*, 2010, 955(1-3): 61-65.
- [18] GE M H, ZHENG Y J. Stereo-dynamics study of $O + HCl \rightarrow OH + Cl$ reaction on the $^3A''$, $^3A'$, and $^1A'$ states [J]. *Theor Chem Acc*, 2011, 129(2): 173-179.
- [19] HAN B R, YANG H A, ZHENG Y J, et al. Quasi-classical trajectory and quantum mechanics study of the reaction $H(^2S) + NH \rightarrow N(^4S) + H_2$ [J]. *Chem Phys Lett*, 2010, 493(4-6): 225-228.
- [20] ZHANG J, CHU T S, DONG S L, et al. Influence of isotope effects on the stereodynamics of the $N(^4S) + H_2 \rightarrow NH + H$ reactive system: a QCT study [J]. *Chin Phys Lett*, 2011, 28(9): 093403.
- [21] WANG M L, HAN K L, HE G Z. Product rotational polarization in the photoinitiated bimolecular reaction $A + BC \rightarrow AB + C$ on attractive, mixed and repulsive surfaces [J]. *J Chem Phys*, 1998, 109(13): 5446-5454.
- [22] WU V W-K. Product rotational angular momentum polarization in the $H + FCl(v=0-5, j=0, 3, 6, 9) \rightarrow HF + Cl$ reaction [J]. *Phys Chem Chem Phys*, 2011, 13(18): 9407-9417.
- [23] YU Y J, XU Q, XU X W. Influence of rotational excitation and collision energy on the stereo dynamics of the reaction: $N(^4S) + H_2(v=0, j=0, 2, 5, 10) \rightarrow NH(X^3\Sigma^-) + H$ [J]. *Chin Phys B*, 2011, 20(12): 123402(123401-123410).
- [24] MAITI B, KALYANARAMAN C, PANDA A N, et al. Reaction probabilities and reaction cross sections for three-dimensional $He + H_2^+(v)$ collisions: a time-dependent quantum mechanical study [J]. *J Chem Phys*, 2002, 117(21): 9719-9726.
- [25] 韩克利, 何国钟, 楼南泉. 立体化学反应动态学 [J]. *化学物理学报*, 1998, 11(6): 525-529.
HAN Ke-li, HE Guo-zhong, LOU Nan-quan. Dynamical stereodynamics of bimolecular reactions [J]. *Chin J Chem Phys*, 1998, 11(6): 525-529.