



TURKISH CHEMICAL SOCIETY

Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry

Owned by the Turkish Chemical Society

Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org

Founded in February, 2014

**STATE-TO-STATE WAVE PACKET SCATTERING AND BOUND STATE
CALCULATIONS FOR THE $F+DCI \rightarrow CI+DF$ REACTION BY USING A
WAVE PACKET METHOD**

**F+DCI→CI+DF REAKSİYONU İÇİN DALGA PAKETİ METODU
KULLANILARAK BAĞ DURUMLARININ VE BİREYSEL KUANTUM
SEVİYELERİ ARASINDAKİ SAÇILMALARIN HESAPLANMASI**

Niyazi BULUT^{1*}; Jacek KLOS² and Octavio RONCERO³

¹Firat University, Department of Physics, 23169 Elazig/TURKEY.

²Department of Chemistry and Biochemistry, University of Maryland, College Park, MD
20742 USA.

³Instituto de Fisica Fundamental, C.S.I.C., Serrano 123, 28006 Madrid, Spain

*Corresponding author. bulut_niyazi@yahoo.com

ABSTRACT

Accurate state-to-state quantum wave packet calculations of integral cross sections for the title reaction are presented. Calculations are carried out on the best available ground $1^2A'$ global adiabatic potential energy surface of Deskevich *et. al.* [1]. Converged state-to-state wave packet reaction cross sections with the DCl ($v=0, j=0-1; v=1, j=0$) reagent have been calculated for the collision energy range from threshold up to 0.5 eV. Accurate product vibrational and rotational distributions of cross sections have been calculated at selected collision energies. State-to-state and total initial-state resolved rate constants of the title reaction have been calculated in a temperature range of 100-300 K. The present accurate calculations at $v=0, j=0, J=0$ show noticeable differences with previous calculations for the F+HCl reaction. Assuming the reaction coordinate in the F-Cl distance and to estimate the zero point energy in the orthogonal coordinate we have calculated the bound states along the reaction path for frozen F-Cl distance to interpret the results.

Keywords

Cross section, wave packet, rate constant.

ÖZET

Bireysel kuantum seviyeleri (state-to-state) arasındaki gerçek integral tesir kesitlerinin hesaplanması kuantum dalga paketi metodu kullanılarak yapıldı. Hesaplamalar Deskevich ve diğ. [1] tarafından hesaplanan taban durumundaki $1^2A'$ adiabatic potansiyel enerji yüzeyi üzerinde gerçekleştirildi. Bireysel kuantum seviyeleri arasındaki integral tesir kesitleri DCI molekülünün ($v=0, j=0-1; v=1, j=0$) kuantum durumları için çarpışma enerjisinin eşik (threshold) değerinden 0.5 eV değerine kadar hesaplandı. Sabit enerji değerleri için ürün molekülün titreşim ve dönme integral tesir kesiti dağılımları hesaplandı. 100-300 K sıcaklığında reaksiyon hız sabitleri hesaplandı. $v=0, j=0, J=0$ kuantum durumları için yapılan hesaplamalar daha önceki F+HCl reaksiyonu için yapılan hesaplamalardan oldukça farklıdır. F-Cl arasındaki mesafe sabit kabul edilip orthogonal koordinatlar kullanılarak sıfır nokta enerjisi tahmin edildi ve sonuçları yorumlamak için reaksiyon yolu boyunca bağ durumları hesaplandı.

Anahtar Kelimeler

Tesir kesiti, dalga paketi, hız sabiti.

Kaynaklar / References

[1] Deskevich *et. al.* J. Chem. Phys., **124**, 224303, (2006).