[Article]

94

www.whxb.pku.edu.cn

N₂O 分子 C¹Π 态的吸收光谱及解离动力学

甄 承 胡亚华 刘世林 周晓国*

(合肥微尺度物质科学国家实验室(筹),中国科学技术大学化学物理系,合肥 230026)

摘要: 通过四波混频差频的方法产生高分辨的真空紫外激光,用以测量 143.6 至 146.9 nm 范围内的射流冷却 N₂O 分子吸收光谱,对应于 C'II←X'∑'的吸收跃迁. 谱图显示出三个分立的振动谱峰叠加在宽吸收背景上, 谱峰 间隔分别是 521 和 482 cm⁻¹. 前人的高精度量子化学计算表明 C'II 态在 N—O 键长方向表现为无势垒的排斥态, 而在 N—N 键伸缩及 N₂O 弯曲振动方向则表现为束缚态,因此观测到的振动谱峰被归属为激发态的 Feshbach 共振. 通过反 Fourier 变换可以得到 Feshbach 共振对应的非稳定周期轨道的特征周期为 61 fs,相应的振动频率 为 546 cm⁻¹. 鉴于这一频率与弯曲振动频率非常接近, 非稳定周期轨道被认为是由 C'II 态的弯曲振动与解离运 动相互作用而形成的, N—N 伸缩振动没有参与形成非稳定周期轨道. 由此, N₂O 分子 C'II 态光激发-解离过程得 以清晰地阐述.

关键词: 吸收光谱; 一氧化二氮; 真空紫外光; 解离 中图分类号: O644; O643

Absorption Spectrum and Dissociation Dynamics of the $C^1\Pi$ State of N₂O

ZHEN Cheng HU Ya-Hua LIU Shi-Lin ZHOU Xiao-Guo*

(Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale, Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, P. R. China)

Abstract: The absorption spectrum of the N₂O molecule in the wavelength range of 143.6–146.9 nm was measured under the jet-cooled condition by using the high resolution vacuum ultraviolet radiation, which was generated by resonance-enhanced difference-frequency mixing, corresponding to the $C^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+$ transition. Three vibrational bands were observed with frequency intervals of 521 and 482 cm⁻¹, and they were superimposed on a wide absorption background. Previous high-level quantum chemical calculations indicate that the $C^1\Pi$ state of N₂O is dissociative along the N—O elongation, while it is bound along the N—N bond stretching or N₂O bending. Therefore, the observed vibrational progression is a Feshbach resonance of the dissociative transition state. From an anti-Fourier transformation analysis, the recurrence period of the unstable periodic orbit of the Feshbach resonance was found to be 61 fs and the corresponding vibrational frequency was 546 cm⁻¹. Since this vibrational frequency is close to the frequency of the bending motion, the unstable periodic orbit is mostly composed of the bending motion of the $C^1\Pi$ state coupled with dissociation. The N—N stretching vibration does not participate in its formation. Therefore, we describe the excitationdissociation dynamics of the $C^1\Pi$ state of N₂O clearly.

Key Words: Absorption spectrum; N₂O; Vacuum ultraviolet; Dissociation

作为一种温室气体, N₂O 分子在燃烧化学和大 气化学中有着重要的地位^[12]. 当吸收真空紫外光后,

N₂O分子会发生光解,生成解离产物O(¹D)原子,而O(¹D)原子不仅在臭氧层的自然循环过程中起着关

国家自然科学基金(20533070, 20603033), 安徽省自然科学基金(070415214)和国家重点基础研究发展规划项目(973)(2007CB815204)资助

© Editorial office of Acta Physico-Chimica Sinica

Received: September 17, 2009; Revised: October 30, 2009; Published on Web: December 4, 2009.

^{*}Corresponding author. Email: xzhou@ustc.edu.cn; Tel: +86-551-3600031; Fax: +86-551-3602323.

The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (20533070, 20603033), Natural Science Foundation of Anhui Province, China (070415214), and National Key Basic Research Program of China (973) (2007CB815204).

键的作用,而且还常被用作实验室研究相关化学反 应动力学中激发态氧原子的来源[3-5]. N₂O 分子的吸 收光谱覆盖紫外区到真空紫外区,最红端位于240 nm 附近, 其中自 160 至 220 nm 的吸收带对应于 *B*¹Δ←*X*¹Σ⁺的吸收^[6], 而自 139 到 168 nm 的吸收光谱, 则被归属于 N_0 分子的 $C^{l}\Pi \leftarrow X^{l}\Sigma^{+}$ 的吸收跃迁^[7-9], 此时 N₂O 分子的解离原子碎片以 O(¹S)和 O(¹D)为 主[10,11]. 值得注意的是, 这两段吸收光谱的结构均表 现为分立谱峰叠加在宽的连续背景上,早期的理论 研究描述了 N₂O 分子各电子态势能面的基本特征^[12], 其中 B¹Δ 态是典型的预离解态,其平衡键角相对基 电子态(线性分子)有很大的变化,同时在 N-O 键 长方向存在一个低的解离势垒. 最近的激发态量子 波包计算^[13]证实了 B¹Δ 态的势能面特征, 获得的 B¹Δ 态吸收截面与实验结果非常吻合, 而吸收光谱的分 立谱峰被归属为 Feshbach 共振¹⁴.

相对而言, N₂O 分子 C'II 态的实验和理论结果 则相去甚远.早期的实验研究中,Duncan^[7]将观测到 的 C^III 态分立谱峰指认为 N₂O 分子的弯曲振动, 而 Zelikoff 等¹⁸则将分立结构归属为 N₂O 分子的对称 伸缩振动序列.事实上,由于当时缺乏 C^IⅡ 态的分 子结构和势能面信息,这些光谱归属具有很大的随 意性. 早期的量子化学计算^[12]表明 C¹Π 态在 N-O 键长方向表现为无势垒的排斥态.由此,C^IⅡ态吸收 光谱被预测为无结构的连续谱带,但这无法解释实 验中观测到的分立谱峰结构.最近, Daud 等¹⁵应用 高精度的完全活性空间自洽场计算(CASSCF)和多 参考态组态相关计算(MRCI)方法计算了 N₂O 分子 各电子态的势能面、吸收截面及解离产物的量子态 布居,结果显示尽管 N₂O 分子的 C'Π 态在 N—O 键 长方向是排斥的,但其 Franck-Condon 区域内分子 势能下降平缓,同时弯曲振动在激发过程非常有利 (基态是线性,而激发态为弯曲构型).这样,吸收光 谱中的分立谱峰则有可能来源于解离过程中弯曲振 动与 N-O 键断裂相互竞争形成解离过渡态的振动 激发(类似于 $B^{l}\Delta$ 态的 Feshbach 共振).

为了在实验上验证这样的猜测,必须首先得到 清晰的振动分辨吸收光谱,尽可能去除热带及谱带 重叠的影响,从而通过光谱在频域上的反 Fourier 变 换计算其自相关函数谱,得到 Feshbach 共振对应的 非稳定周期轨道的特征周期.当前的研究中,我们在 射流冷却条件下重新测量了 №O 分子在 143.6 至 146.9 nm 范围内的吸收光谱,由于充分的振转温度 冷却,获得的光谱极大地降低了热带的影响.通过反 Fourier 变换得到非稳定周期轨道的特征周期,由此 我们不仅能够指认 N₂O 分子 C^III 态吸收光谱中分 立谱峰结构的来源,而且还可以获得分子解离动力 学过程的微观描述.

1 实验装置和原理

1.1 实验装置

当前的实验装置主要包括射流冷却的分子束系统、脉冲真空紫外光(VUV)源、真空紫外光吸收的检测系统,其中激光与分子束间的时间延迟由脉冲发生器(DG535, Stanford Research Systems, USA)控制.具体细节详见文献[16-18].

脉冲真空紫外光由四波混频差频($\omega_{vUv}=2\omega_1-\omega_2$) 过程产生.具体操作为,一台 Nd:YAG 激光器(Lab-190-10, 10 ns, Spectra-Physics, USA)的三倍频光(355 nm) 经分束镜分为两束后,分别泵浦两台染料激光 器(PRLC-LG-18 和 PRLC-LG-24, Sirah, Germany), 输出的两束染料激光在混频池中聚焦重合.在当前 的实验中, Kr 气作为非线性介质,固定一束染料激 光波长在 Kr 原子的(4p)⁵($^2P_{32}$)5p, [1/2]。 \leftarrow (4p)⁶, 1S_0 的 双光子共振吸收峰处($2\omega_1=94093.66$ cm⁻¹),扫描另外 一束可见染料激光 ω_2 从而获得可调谐的脉冲真空 紫外激光,其单脉冲激光能量约为 0.1 μ J·pulse⁻¹^[17]. 输出的激光经分光室内的 LiF 棱镜(15°)分光,只选 择允许 VUV 光进入吸收区,与超声射流分子束作用.

实验中,前滞压强为 1.2×10⁵ Pa 的 N₂O 气体经 脉冲喷嘴射入真空腔体,在下方 5 mm 处与 VUV 激 光相互作用.为了增加分子束对光的吸收长度,采用 狭缝喷嘴(0.1 mm×10 mm, General Valve, USA)使气 束沿激光传播方向压扁拉长至约 10 mm. 真空室的 动态真空是 1.0×10⁻² Pa. 为了准确测量脉冲 VUV 激 光的线宽和分子束的冷却温度,在 N₂O 气体中掺入 体积分数为 5%的 CO 气体,通过检测 CO 的 *A*¹*I*← *X*¹*S*⁺的激光诱导荧光,测得当前的 VUV 激光的线宽 约 0.3 cm⁻¹,对荧光谱的温度拟合得到射流冷却分子 束的转动温度约为 40 K. 考虑到混合气体中 N₂O 占 绝大多数, CO 的温度可以认为是整个分子束体系 的转动温度.实验中使用的 N₂O 和 CO 气体均由南 京特种气体厂提供,纯度分别是 99.8%和 99.9%. 气 体在实验前没有进一步纯化.

为了直接获得吸收光谱,沿光传播路径在光与分子束作用前后各放置一个LiF平板,将约5%的VUV

光反射进入两个相同型号的光电倍增管(9403B, Electron Tubes, UK),从而同时监测吸收前后的激光 光强.光电倍增管输出的电信号经数字示波器平均 后,由计算机记录处理.

1.2 吸收光谱的测量原理

分子束对光的吸收遵循 Beer-Lambert 定律:

I(*λ*)=*I*₀(*λ*)e^{-*N*σ(*λ*)} (1) 其中 *I*₁(*λ*)和 *I*₀(*λ*)分别为透射光强和入射光强, *N*、 *σ*(*λ*)和 *I* 分别为分子的数密度、吸收截面和吸收程. 此外,尽管两个光电倍增管型号完全相同,但是其对 输入光强的响应仍会存在差别.采用参比实验的方 法可消除这种影响,即当不打开喷嘴进行空扫时, 前后光电倍增管获得的光强分别以 *I*'(*λ*)和*I*'₀(*λ*)表 示,这样真实的吸收光谱强度 *S*(*λ*)可由下式表示:

$$S(\lambda) \propto -\ln\left[\frac{(I_{l}(\lambda))}{I_{0}(\lambda)} / \frac{I_{l}'(\lambda)}{I_{0}'(\lambda)}\right]$$
(2)

显然,由于(2)式中各光电倍增管记录的光强分别以 比例出现,这样两个光电倍增管对光强响应的差别 可以得到消除.

2 结果与讨论

射流冷却的 N₂O 分子在 143.6-146.9 nm 范围 内的吸收光谱如图 1(a)所示(能量范围是 68050-69620 cm⁻¹),最近 Nee 等¹⁰在气室中采用同步辐射光 源测量得到的 64500-71500 cm⁻¹范围的吸收光谱 如图 1(b).尽管受限于染料波长,当前的实验光谱没 有覆盖更多的波长范围,但是当前的吸收图与前人 的实验工作基本一致,只是三个振动峰的相对强度



图 1 不同实验条件下 N₂O 分子 C¹*I* ← X¹Σ⁺的吸收光谱 Fig.1 Absorption spectra of the C¹*I* ← X¹Σ⁺ transition of N₂O measured at different experimental conditions (a) with the jet-cooled molecular beam; (b) in a flowing absorption cell at room temperature measured by Nee *et al.*^[9], and assignment of the resonance peaks are shown as Nee *et al.* used in Ref.[9].

明显不同.考虑到图 1(b)的测量中存在大量的热带 激发和转动激发,谱峰重叠非常严重,而当前的吸收 实验中由于采用射流冷却,分子束温度约 40 K,转 动激发引起的谱峰重叠几乎不存在,同时热带激发 也得到了有效的抑制,从而使得振动峰的相互重叠 得到有效削弱,各振动峰的强度相对独立,因此当前 的吸收谱较 Nee 等的结果显示出更为清晰的振动 谱带结构,同时振动峰强度也有所差异.总体而言, 在 68050-69620 cm⁻¹能量范围内, №O 分子的吸收 光谱表现为三个非对称的分立振动谱峰叠加在宽的 吸收背景上,两振动谱峰间隔分别是 521 和482 cm⁻¹.

理论计算^[12,15]表明 N₂O 分子 C^III 态是典型的排 斥态,可以解离生成 NO 和 O(¹D)原子. 通常, 这样的 排斥态对应的吸收光谱表现为无振转结构的宽带. 然而,实验中却清楚地观测到分立的振动谱峰.如前 所述,理论计算的势能面临表明,这样的吸收谱峰结 构可能是由于 $C^{\downarrow}\Pi$ 态的 Feshbach 共振导致的. 具体 而言, N₂O 分子 C¹Π态的弯曲振动或 N-N 伸缩振 动在解离过程中与 N-O 键的断裂相互竞争, 从而 形成一个非稳定的周期轨道,即分子由基电子态被 激发到排斥的上电子态时, 波包从 Franck-Condon 区向周围随机扩散,其中绝大部分波包沿着解离方 向运动,促使分子快速离解,然而有少部分波包则会 沿着一些特殊的路径振荡运动(如 N₂O 分子的弯曲 振动模式或 N-N 伸缩振动模式), 从而导致波包振 荡回其初始位置附近,这样波包在向解离方向运动 的同时也会沿这些路径振荡一个或者几个周期,形 成吸收光谱中的分立结构谱峰.考虑到当前的激发 能量范围是 68050 至 69620 cm⁻¹, 远超过 C¹Π 态的解 离限,因此 N₂O 弯曲振动或 N-N 伸缩振动所对应 的非稳定周期轨道都可能导致吸收光谱的分立谱峰.

为证实以上猜测,同时也为确定非稳定周期轨 道究竟来自 N₂O 弯曲振动还是 N—N 伸缩振动,需 要对测量的吸收光谱做适当处理和分析.由于分子 电子态的吸收光谱与量子态波包在上电子态的动力 学行为密切相关,其吸收截面 σ(E)、激发能量 E 以 及激发强度 S(t)之间存在如下的反 Fourier 变换关 系:

$$\sigma(E) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt/\hbar} S(t) dt$$
(3)

(4)

 $S(t) = \langle \Phi(t) | \Phi(0) \rangle$

其中 S(t)为自相关函数, $\Phi(0)$ 为初始时刻上电子态

的量子波包, Φ(t)则为 t 时刻上电子态的波包, ħ=h/ 2π, h 为普朗克常数. 这样, 通过反 Fourier 变换分析 可以得到对应时域的自相关函数 S(t), 其极大值将反 映非稳定周期轨道的特征周期. 类似的反 Fourier 变 换分析曾被应用于 CO₂¹⁰⁹、O₃^[2021]和 OCS^[2023]等分子体 系的电子激发态解离动力学研究. 图 2 显示在射流 冷却条件下测量的 N₂O 吸收光谱反 Fourier 变换结 果. 自相关函数 S(t)在 61 fs 处出现极大值, 这样就 意味着 N₂O 分子C^III 态存在着一个周期为 61 fs 的 非稳定周期轨道. 该振动周期对应频域的谱峰间隔 为546 cm⁻¹, 接近实验观测到的谱峰间隔(521 和 482 cm⁻¹). 考虑到实验谱峰间隔是通过振动峰的最强处 直接读取获得, 而非对称谱峰形状及转动加宽等因 素都会造成测量的误差, 因此当前反 Fourier 变换得 到的振动频率和实验测量的光谱间隔是基本一致的.

如前所言, N₂O 分子的 C¹Π 电子态在 N—O方向 是直接解离的排斥态, 因此理论计算没有给出振动 频率. 然而, Hopper^[12]曾利用多组态自洽场 MCSCF 计算得到了 N₂O 分子的各电子态在线性分子构型 时的势能面. 其中 C¹Π 态势能曲面上, 分子在 N—N 伸缩方向的 Franck-Condon 区域内 C¹Π 态与基电子 态的势能形状几乎完全一样, 这样可以预见 C¹Π 态 的 N—N 伸缩振动频率应该与基电子态非常接近, 约 为 1284.903 cm^{-1[24]}. 遗憾的是, 迄今为止 C¹Π 态弯曲 振动频率未见报道, 而 X¹Σ⁺基电子态和 B¹Δ 态的弯 曲振动频率分别是 588.768 cm^{-1[25]}和 589.61 cm^{-1[26]}. 显然, 尽管 X¹Σ⁺态和 B¹Δ 态的平衡键角差别很大^[15], 但其弯曲振动频率则非常接近. 考虑到 B¹Δ 态和





anti-Fourier transform of the absorption spectrum of the $C^1\Pi$ state of jet-cooled N₂O

 R_{auto} : autocorrelation; The corresponding absorption spectrum is shown in the insert panel as well.

C^IⅡ态的键角变化势能曲线的斜率比较接近^{15]},则 C^IⅡ态的弯曲振动频率应该也约为580 cm⁻¹.由前 面的反 Fourier 变换知道,当前观测到的非稳定周期 轨道特征周期为61 fs,对应振动模式的频率为546 cm⁻¹,远小于 C^IⅡ态 N—N 伸缩振动频率,却与预测 的弯曲振动频率比较接近.这意味着观测到的非稳 定周期轨道仅仅是由 N₂O 弯曲振动与 N—O 键解 离运动相互竞争形成的, 而 N—N 伸缩振动则在光 解离的过程中未参与形成非稳定周期轨道.

进一步,考虑到当前实验光谱所包含的能量范 围很窄, 仅涉及 v=12-14 三个振动谱峰(见图 1), 那 么在整个 C^I∏ 态吸收光谱范围内,除了存在弯曲振 动相关的非稳定周期轨道, N-N 伸缩振动是否也 会在解离过程中被激发呢?为此,我们以 Nee¹⁹和 Zelikoff[®]等的实验吸收光谱为对象,分别对光谱进 行了反 Fourier 变换分析, 两个结果完全一致. 由于 在低能量端Zelikoff 等¹⁸的实验光谱细节更为清晰, 这里以这个吸收光谱为例,其反 Fourier 变换结果如 图 3 所示.显然,尽管由于振动谱峰的重叠和转动加 宽非常严重,但是在包括了更多的振动谱峰后得到 唯一的非稳定周期轨道的特征周期是 66 fs. 与射流 冷却的吸收光谱得到的 61 fs 特征周期非常接近, 这 意味着在整个 N₂O 分子 C^III 态的吸收光谱中, 分立 的振动谱峰几乎完全是由波包沿弯曲振动相关的非 稳定周期轨道振荡引起的.

由此, N₂O 分子 C^III 态的光激发-解离过程得以 清晰地描述.在吸收了一个真空紫外光子后, N₂O 分 子被激发到 C^III 电子态.由于 C^III 态是排斥态,量子



图 3 室温下 N₂O 分子 C¹II 态吸收光谱的反 Fourier 变换 得到的自相关函数

Fig.3 Autocorrelation function obtained from the anti-Fourier transform of the absorption spectrum of the $C^1\Pi$ state of N₂O at room temperature

The corresponding absorption spectrum comes from Ref.[8] and is shown in the insert panel as well. 波包从 Franck-Condon 区向周围随机扩散,其中绝 大部分波包沿 N—O 键长方向运动,使分子快速解 离,同时有少部分波包则会沿着弯曲振动的模式来 回振荡,从而导致波包回到其初始位置附近,这样波 包在向解离方向运动的同时也会沿弯曲振动参与的 非稳定周期轨道振荡一个或者几个周期,从而最终 形成吸收光谱中的分立结构谱峰.也就是说,实验观 测到的 C^III 态吸收光谱的分立振动谱峰的来源与 *B*¹Δ 态类似,均是由激发态的 Feshbach 共振引起的.

3 结 论

通过四波混频差频的方法在实验室产生高分辨 的真空紫外激光,用以测量了 68050 至 69620 cm⁻¹ 范围内的射流冷却条件下 N₂O 分子的吸收光谱.该 段吸收光谱对应于 N₂O 分子 C¹*II*←X¹∑⁺单光子吸收 跃迁,谱图显示出三个分立的振动谱峰叠加在一个 宽吸收背景上,谱峰间隔分别是 521 和 482 cm⁻¹.

前人的高精度量子化学计算表明 C^IΠ 态是典 型的离解态,在 N-O 键长方向表现为无势垒的排 斥态, 而在 N-N 键伸缩及 N₂O 弯曲振动方向则表 现为典型的束缚态.由此, N₂O 分子 C'II 态吸收光 谱中的分立振动峰被认为是激发态波函数在排斥态 和束缚态的共同作用下沿非稳定周期轨道振荡解离 的贡献.为确认非稳定周期轨道的来源,我们对当前 的吸收光谱进行了由频域到时域的反 Fourier 变换 分析,得到了唯一的非稳定周期轨道,其特征周期为 61 fs,相应振动频率为 546 cm⁻¹, 与观测的振动谱峰 间隔一致,由于该振动频率值接近弯曲振动频率,因 此当前的非稳定周期轨道被认为是由 C^IΠ 态的弯 曲振动与解离运动相互作用而形成的, N-N 伸缩 振动则在分子解离过程中没有被激发.进一步,利用 前人观测的 C^IΠ态完整吸收光谱进行反 Fourier 变 换,获得唯一非稳定周期轨道的特征周期为 66 fs, 与当前得到的 61 fs 特征周期非常接近, 这意味着在 N₂O 分子整个 C^I П 态的吸收跃迁中, N—N 伸缩振 动始终没有参与形成非稳定周期轨道,观测到的分 立振动峰完全是由波包沿弯曲振动相关的非稳定周 期轨道振荡引起的.

最终,我们得到了 N₂O 分子 C'II 态的光激发-解离过程的动力学图像: N₂O 分子被激发至 C'II 电 子态后,波包由 Franck-Condon 区向周围随机扩散, 其中绝大部分波包沿 N—O 键长方向运动解离,而 少部分波包则沿弯曲振动模式来回振荡,这种波包 一边解离一边沿非稳定周期轨道振荡的动力学行为 最终形成吸收光谱中的分立振动谱峰.

References

- 1 Wayne, R. P. Chemistry of atmospheres. Clarendon: Oxford, 1991
- Climate Change 1994; Radiative forcing of climate change and an evaluation of the IPCC 1992 IS92 emission scenarios. Houghton, J. T.; Filho, L. G. M.; Harris, N. B. Eds. Cambridge: Cambridge University Press, 1995
- 3 Brouard, M.; Duxon, S. P.; Enriquez, P. A.; Simons, J. P. J. Chem. Phys., 1992, 97: 7414
- 4 Brouard, M.; Lambert, H. M.; Short, J.; Simons, J. P. J. Phys. Chem., 1995, 99: 13571
- 5 Alexander, A. J.; Aoiz, F. J.; Brouard, M.; Burak, I.; Fujimura, Y.; Short, J.; Simons, J. P. *Chem. Phys. Lett.*, **1996**, **262**: 589
- 6 Leifson, S. W. Astrophys. J., 1926, 63: 73
- 7 Duncan, A. B. F. J. Chem. Phys., 1936, 4: 638
- Zelikoff, M.; Watanabe, K.; Inn, E. C. Y. J. Chem. Phys., 1953, 21: 1643
- 9 Nee, J. B.; Yang, J. C.; Lee, P. C.; Wang, X. Y.; Kuo, C. T. Chin. J. Phys., **1999**, **37**: 172
- Young, R. G.; Black, G.; Slanger, T. G. J. Chem. Phys., 1968, 49: 4769
- 11 Black, G.; Sharpless, R. L.; Slanger, T. G.; Lorents, D. C. J. Chem. Phys., 1975, 62: 4266
- 12 Hopper, D. G. J. Chem. Phys., 1984, 80: 4290
- 13 Nanbu, S.; Johnson, M. S. J. Phys. Chem. A, 2004, 108: 8905
- 14 Feshbach, H. Ann. Phys., 1958, 5: 357
- 15 Daud, M. N.; Balint-Kurti, G. G.; Brown, A. J. Chem. Phys., 2005, 122: 54305
- 16 Li, Q. F.; Wang, H.; Shi, Y.; Dai, J. H.; Liu, S. L.; Yu, S. Q.; Ma, X. X. Chin. J. Chem. Phys., 2004, 17: 333 [李奇峰, 汪 华, 石 勇, 戴静华, 刘世林, 俞书勤, 马兴孝. 化学物理学报, 2004, 17: 333]
- Li, Q. F.; Wang, H.; Yu, Y. Q.; Liu, S. L.; Yu, S. Q.; Ma, X. X. Chin. J. Chem. Phys., 2005, 18: 474 [李奇峰, 汪 华, 喻远琴, 刘世林, 俞书勤, 马兴孝. 化学物理学报, 2005, 18: 474]
- 18 Hu, Y. H.; Zhen, C.; Dai, J. H.; Zhou, X. G.; Liu, S. L. Chin. J. Chem. Phys., 2008, 21: 415
- 19 Schinke, R.; Engel, V. J. Chem. Phys., 1990, 93: 3252
- 20 Johnson, B. R.; Kinsey, J. L. Phys. Rev. Lett., 1989, 62: 1607
- 21 Johnson, B. R.; Kinsey, J. L. J. Chem. Phys., 1989, 91: 7638
- 22 Yamanouchi, K.; Ohde, K.; Hishikawa, A.; Pibel, C. D. Bull. Chem. Soc. Jpn., 1995, 68: 2459
- 23 Hishikawa, A.; Ohde, K.; Itakura, R.; Liu, S. L.; Yamanouchi, K.; Yamashita, K. J. Phys. Chem. A, 1997, 101: 694
- 24 Toth, R. A. J. Opt. Soc. Am. B, 1986, 3: 1263
- 25 Jolma, K.; Kauppinen, J.; Horneman, V. M. J. Mol. Spectrosc., 1983, 101: 278
- 26 Toth, R. A. Appl. Opt., 1991, 30: 5289