

飞秒时间分辨质谱方法研究 CF_3I 光电离动力学*

尹淑慧**, 刘红平, 张建阳, 姜波, 王利, 沙国河, 楼南泉

(中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连 116023)

摘要: 利用飞秒双色泵浦-探测 (pump-probe) 飞行时间质谱方法研究了 CF_3I 分子多光子电离动力学, 所用泵浦光及探测光的中心波长分别为 265 和 398 nm. 获得了母分子离子 CF_3I^+ 信号及其碎片离子 CF_3^+ 和 I^+ 信号的寿命衰减常数分别为 (96 ± 7) 、 (198 ± 13) 和 (167 ± 6) fs. 这些离子产生的多光子通道机理不同: CF_3I^+ 来自 $(1+2')$ 跃迁, 单光子泵浦光与 CF_3I A 带共振, 双光子泵浦光激发 CF_3I 分子到 $5p\pi 7s\delta(^2\Pi_{1/2})$ 里德伯态, 单光子探测光电离产生的母分子离子解离产生 CF_3^+ ; I^+ 来自 $(2+2')$ 和 $(1+1'+2')$ 激发过程.

关键词: 飞秒; 泵浦-探测; 光电离; 寿命

中图分类号: O64 文献标识码: A

Studies of Photoionization of CF_3I

by Femtosecond Time-resolved Mass Spectrometry*

Yin Shuhui**, Liu Hongping, Zhang Jianyang, Jiang Bo, Wang Li, Sha Guohe, Lou Nanquan

(State Key Laboratory of Molecular Reaction Dynamics, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023)

Abstract The multi-photon dissociative photoionization dynamics of CF_3I has been studied with femtosecond two-color pump-probe time of flight mass spectra at a pump pulse of 265 nm and a probe pulse of 398 nm. The life constants of CF_3I^+ and its fragment ions CF_3^+ and I^+ are obtained as (96 ± 7) , (198 ± 130) and (167 ± 6) fs, respectively. The multi-photon dynamics leading to these ions differ. CF_3I^+ corresponds to a $(1+2')$ transition with one-photon pump excitation to the A band of CF_3I . CF_3^+ are mainly formed by a two-photon probe excitation to the CF_3^+ with subsequent dissociation of parent ions. I^+ are produced in $(2+2')$ combined with $(1+1'+2')$ process. The results provide information on the multi-photon pathways involved.

Key words Femtosecond, Pump-probe, Photoionization, Lifetime

1 引言

通过光解研究获得的激发态寿命为确定分子的光解机制提供了重要的信息. 这些信息有助于我们确定分子光解通道的模型. 在飞秒激光技术出现以前, 人们利用自发共振拉曼 (spontaneous resonance

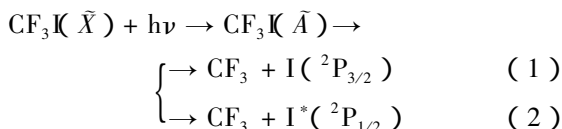
Raman)^[1]、离子凹陷 (ion dip)^[2]、激光诱导荧光 (laser-induced fluorescence)^[3] 等间接方法推出激发态的寿命. 飞秒激光技术的出现实现了对激发态寿命的实时测量, 并能够给出相关动力学过程的清晰的物理图像. 本工作即利用飞秒双色泵浦-探测 (pump-probe) 技术结合飞行时间质谱方法来获得

* 国家自然科学基金 (29833080, 29953001) 资助项目. ** 通讯联系人, E-mail: yinshu@dicp.ac.cn

收稿日期: 2002-11-25, 修回日期: 2003-01-10.

CF₃I 分子激发态寿命,并由此来了解 CF₃I 分子的多光子电离动力学信息.

CF₃I 分子在光解反应动力学研究中一直扮演着非常重要的角色.有关 CF₃I 分子第一紫外吸收带(A带)已经有许多研究.在以 260 nm 附近为中心的第一紫外吸收带(A带)内的光激发导致 CF₃I 分子按以下方式快速解离^[4]:



I(²P_{3/2})是基态碘原子, I*(²P_{1/2})是碘原子的自旋-轨道激发态,二者能级差别为 7603 cm⁻¹. 碘原子的强烈的自旋-轨道耦合(LS Coupling)导致了能量上明显分开的两个反应通道(1)和(2),因而提供了研究两个势能面之间非绝热过程的机会. CF₃I 在第一吸收带(A带)的光激发会进入三个排斥电子态,按能级从低到高分别为 ³Q₁、³Q₀ 和 ¹Q₁^[5]. 根据磁环分光实验(Magnetic Circular Dichroism, MCD)的测量结果^[6], CF₃I 分子第一吸收带(A带)可以被分解成占优势的 ³Q₀← \bar{X} 跃迁成分和分别处于其低能和高能两侧的较小的两个跃迁成分, ³Q₁← \bar{X} 和 ¹Q₁← \bar{X} . 最强的到 ³Q₀ 态的跃迁取向平行于 C-I 键并和解离产物 CF₃+I*(²P_{1/2})绝热相关. 到 ³Q₁ 和 ¹Q₁ 两个态的弱的跃迁则是垂直跃迁,和基态碘原子 I(²P_{3/2})的形成相关^[7]. 从理论的观点看, CF₃I 分子的 C_{3v} 对称结构使其可以作为线性准三原子(linear pseudo-triatomic)分子模型来近似处理^[8,9]. 实验上应用纳秒脉冲激光在 248^[10]、277^[11]、304^[12,13] 和 308 nm^[14] 等波长下,利用光解碎片平动能谱和共振增强多光子电离飞行时间质谱等方法,研究了 CF₃I 的 A 带光解动力学. 实验结果和理论研究都表明,尽管 CF₃I 的光解产物基态碘原子 I(²P_{3/2})与垂直跃迁的态相关联,然而 I(²P_{3/2})的分布却表现出平行跃迁成分,说明基态碘原子 I(²P_{3/2})可以来自于 ³Q₀ 态,在解离过程中又转移到 ¹Q₁ 的势能面上,即在 CF₃I 的势能面 ³Q₀ 和 ¹Q₁ 之间存在着非绝热相关过程. 所以, CF₃I 在 A 带的光解产物基态碘原子 I(²P_{3/2})的产生有两个过程,其一是通过平行跃迁到 ³Q₀ 态,然后在解离过程中通过能级交叉转移到 ¹Q₁ 的通道,另一个则是通过垂直跃迁到 ³Q₁ 或 ¹Q₁ 态,然后直接解离.

对于 CF₃I 分子的高激发态, Sutcliffe 和 Walsh

研究了 CF₃I 分子的里德伯态^[15]. 他们报告了 CF₃I 分子的真空紫外(vacuum-ultraviolet)吸收光谱,确定了一个 ns 里德伯系列,并测定了 CF₃I 分子的第一电离能为 83984 cm⁻¹(10.41 eV);利用单光子真空紫外吸收光谱,在 132.3 nm 处观测到一个吸收带,并把这一吸收带指认为 5pπ³7sδ(²Π_{1/2})里德伯态;在比 132.3 nm 处的强吸收带分别短 200 和 400 cm⁻¹的波长处,他们还观测到另外两个吸收带,认为这两个较弱的吸收是由于到 5pπ³7sδ(²Π_{1/2})里德伯态的激发的 ν₃' 振动能级的跃迁造成的. 这一研究结果表明, 5pπ³7sδ(²Π_{1/2})里德伯态是个长寿命态,分子在这个激发态上可以进一步吸收时间延迟了的探测光脉冲而电离. Herzberg 对 CF₃I 分子的真空紫外吸收光谱的研究表明, CF₃I 的(²E_{3/2})6s 里德伯态存在 Jahn-Teller 效应^[16]. 此后, Taatjes 等在 56700~64000 cm⁻¹ 利用(2+1)共振增强多光子电离光谱的方法研究了 CF₃I 分子的(5pπ-6s)里德伯跃迁^[17-19]. 由于碘原子自旋-轨道耦合(5000 cm⁻¹), CF₃I 分子(5pπ-6s)里德伯跃迁分裂为到 \bar{C} 态和 \bar{D} 态的跃迁^[17]. 线宽分析的方法估计 CF₃I 分子 \bar{C} 态的寿命为 50 ps^[17,18]. 当光子在 62500~62918 cm⁻¹ 时,可以得到通过 \bar{D} 态共振电离的信号^[20].

有关 CF₃I 分子的实时动力学的研究较少. Janssen 等最近利用双色飞秒泵浦-探测(pump-probe)实验方法结合离子速度成像技术研究了 CF₃I 的光解电离动力学^[21,22], 所用泵浦光及探测光的中心波长分别为 264 和 396 nm, 与我们实验中所用的飞秒脉冲光的中心波长相近. 我们利用实验室自行研制的飞秒激光器,经倍频及和频技术获得飞秒 265 和 398 nm 脉冲光,结合泵浦-探测共振增强多光子电离技术及飞行时间质谱研究了 CF₃I 光电离动力学,提出了离子碎片产生的多光子通道机理.

2 实 验

实验装置已有过详细的描述^[23], 在这里给出简要的介绍. 飞秒激光器是我们实验室自行研制的掺钛宝石再生放大飞秒激光系统,由振荡器(Oscillator)、展宽器(Stretcher)、放大器(Amplifier)、压缩器(Compressor)四部分组成. 振荡器由一台 Ar⁺ 激光器(Innova 300, Coherent)以 5 W 输出功率全泵浦,产生重复频率为 86 MHz、中心波长约 800 nm、脉

宽 15 ~ 20 fs、平均输出功率为 250 mW 的水平偏振种子光 (seed mode). 该种子光通过展宽器后被送到由一台以声光调制器 (AOQ) 调制和腔内倍频 (LBO) 的 Nd:YAG 激光器 (Spectra-physics) 为泵浦源的再生放大器进行放大, 然后经光栅压缩器压缩, 产生中心波长为 800 nm 左右、重复频率 3 KHz、脉宽 60 ~ 80 fs、平均功率约 600 mW (单脉冲能量约 200 μJ) 的水平偏振飞秒激光.

产生的基频光经过 BBO 晶体进行倍频及和频, 产生的二倍频 (SHG) 及三倍频 (THG) 光的中心波长分别为 265 和 398 nm, 在实验中分别用做泵浦光和探测光. 用双色分束镜 (Dichroic mirror, DC) 将二倍频及三倍频光分离后, 二倍频光进入一个光学延时平台 (Delay-stage, SIGMA KOKI sp26-150) 进行光学延时. 最后二倍频和三倍频光分别经焦距为 29 和 26 cm 的薄透镜 (厚 1.2 mm) 聚焦后共轴经过一个熔融石英布儒斯特窗 (Brewster Window) 进入飞行时间质谱仪 (TOF-MS, Wiley-McLaren 型). 在布儒斯特窗口前, 二倍频及三倍频光的单脉冲能量分别为 20 和 2 ~ 3 μJ .

气体样品通过一毛细管阵列 (Hamamatsu Type J5022-01) 连续喷入飞行时间质谱仪, 形成一连续分子束. 分子束、激光束及 TOF-MS 飞行轴三者方向相互垂直. 由激光电离产生的离子通过一个三电极系统加速后, 经过 35 cm 的自由飞行后到达微通道板 (MCP). 采样速率为 1 GHz 的瞬态记录仪 (STR81G) 对信号进行采集.

3 结果与讨论

3.1 实验数据拟合

在利用泵浦-探测技术对随时间演变的信号进行测量时, 由于激光脉冲有一定的带宽, 因而, 测得的信号强度 $K(t, t_0)$ 是泵浦光与探测光的相关函数 $G(t, t_0)$ 与真正的时间演变信号 $F(t, t_0)$ 的卷积结果:

$$K(t, t_0) = \iint G(t_1, t_0) F(t_2, t_0) \delta(t_1 + t_2 - t) dt_1 dt_2 \quad (3)$$

假设实验中所用的泵浦光和探测光都是高斯线型的, 那么这两束光的相关函数 $G(t, t_0)$ 也是高斯型的. 设离子信号 $F(t, t_0)$ 随时间以指数形式衰减, 利用高斯函数与指数衰减函数的卷积即 (3) 式, 用非线性最小二乘法拟合实验得到的离子信号 $K(t, t_0)$,

即可以得到各个态的寿命衰减常数^[24].

为了在拟合过程中准确获得激发态的寿命, 我们需要测定所用泵浦光与探测光的相关函数及时间零点. 由于还没有建立起成熟的技术来测定真空紫外波段的超短脉冲激光的相关函数, 目前常用来确定泵浦光与探测光的相关函数及时间零点的方法是利用短寿命分子做平行实验^[25], 或利用原子气体, 如氙气 (Xe) 的非共振电离信号. 我们在实验中采用的即是利用 Xe 的非共振电离信号的方法. 实验得到的 Xe^+ 信号强度随泵浦-探测延迟时间的变化具有对称构型, 可以用高斯函数很好地拟合, 由此, 我们得到泵浦光与探测光的相关函数为 (141 ± 1) fs.

3.2 CF_3I 分子的光电离动力学

图 1 是在实验中得到的在几个典型的泵浦-探测延迟时间下的飞行时间质谱. 从图中可以看出, 在泵浦-探测光的激发下, 共用三种离子形成: 母分子离子 CF_3I^+ 及其碎片离子 CF_3^+ 和 I^+ . 其中 CF_3I^+ 及 I^+ 的峰值强度相近, 而 CF_3^+ 的峰值比 CF_3I^+ 和 I^+ 的峰值强几倍. 即在我们的实验条件下, CF_3^+ 和 I^+ 是主要的碎片产物. 在实验中我们还观测到 I^+ 峰随泵浦-探测延迟时间在双峰与单峰间演化的一个有趣的现象: 在延迟零点及较短的延迟时间下, I^+ 为两个峰, 两个峰值间的时间间隔为 160 ns, 当泵浦-探测的延迟时间约为 180 fs 时, I^+ 信号演化为单尖峰, 单尖峰持续约 200 fs. 到泵浦-探测的延迟时间为 360 fs 左右时, 单尖峰又演化为双峰, 并保持为双峰

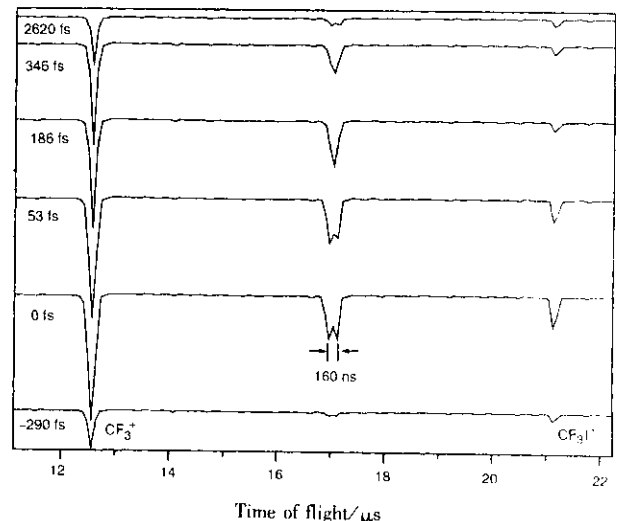


图 1 CF_3I 分子在几个典型的泵浦-探测延迟时间下的质谱

Fig. 1 The femtosecond mass spectrum of CF_3I at several typical delay time between pump and probe pulse

直到 2.6 ps 之后. 在实验中, 我们没有观测到 CF_3I^+ 及 CF_3^+ 有类似的峰形演化, 因此我们可以肯定, I^+ 信号的这种峰形演化不是由于泵浦光与探测光的空时重合不好造成的. 这一实验现象也表明 I^+ 的碎片通道可能与 CF_3^+ 的碎片通道不同.

CF_3I^+ 及 CF_3^+ 和 I^+ 的信号强度随泵浦-探测延迟时间的演化如图 2 所示. 每种离子信号含时演化的特征均为在延迟时间零点附近有一强的共振增强电离峰, 此后随着泵浦-探测时间延迟在飞秒时间范围内快速衰减. 利用前面介绍的实验数据拟合方法, 我们得到 CF_3I^+ 的寿命衰减常数为 (96 ± 7) fs, CF_3^+ 和 I^+ 的寿命衰减常数分别为 (198 ± 13) 和 (167 ± 6) fs. 从图 2 中可以明显地看出, CF_3I^+ 的信号强度随泵浦-探测延迟时间快速衰减至基线附近, 而 CF_3^+ 和 I^+ 在较长的泵浦-探测延迟时间下仍有较强的信号, 信号强度为峰值信号强度的 15% 左右, 并保持此强度直到几个皮秒. 这种现象表明, CF_3I^+ 与 CF_3^+ 和 I^+ 可能来自不同的通道, CF_3^+ 和 I^+ 来自某个长寿命态. 从图 2 中我们还注意到, CF_3^+ 和 I^+ 谱峰的最大值位置与 CF_3I^+ 谱峰的最大值位置相比向正的延迟方向漂移, 数值分别约为 80 和 100 fs.

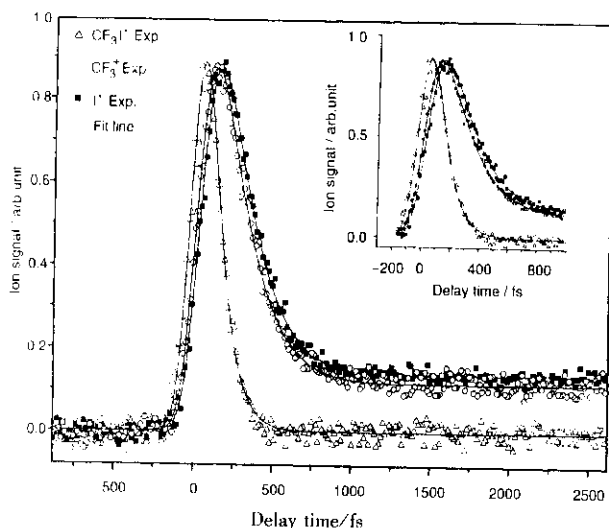


图 2 CF_3I^+ , CF_3^+ 和 I^+ 的泵浦-探测实验与拟合结果

Fig. 2 Experimental (symbols) and fit (solid) lines of CF_3I^+ , CF_3^+ and I^+

图 3 是 CF_3I 分子的电子能级示意图. 从图中可以看出: 265 nm 单光子与双光子泵浦过程分别与 CF_3I 分子的 A 带和 $5p\pi^37s\delta(^2\Pi_{1/2})$ 里德伯态共振. 其中 A 带是一个快速解离带^[4], $5p\pi^37s\delta(^2\Pi_{1/2})$ 里

德伯态是一个长寿命态^[15, 21, 22]. CF_3I^+ 基态 $^2E_{3/2}$ 位于 10.40 eV; 能量最低的离子解离通道是 $\text{CF}_3^+ + \text{I}$ ($^2P_{3/2}$), 位于 10.92 eV; 产生 I^+ 的能量最低的离子解离通道为 $\text{CF}_3 + \text{I}^+$ (3P_2), 能量为 12.70 eV^[26]. 我们实验中所用的泵浦光及探测光的中心波长分别为 265 nm (4.67 eV) 和 398 nm (3.11 eV). 因此, 从能量的观点看 (1+2') 激发过程总能量为 10.89 eV, 这一能量值高于 CF_3I 分子的最低电离势 10.40 eV, 但是低于任何一种碎片离子的形成所需的能量值 10.92 eV (CF_3^+) 及 12.70 eV (I^+), 所以 (1+2') 激发过程的唯一产物只能是 CF_3I^+ . (2+1') 激发过程总能量是 12.45 eV, 这一能量可以通过电离-解离通道产生 CF_3^+ . 而 (1+3') 和 (2+2') 多光子激发过程的总能量分别为 14.0 和 15.56 eV. 这两个激发过程可以产生 I^+ . 在 13.4 eV^[26] 或 14.58 eV^[27] 的激发能量下, 可能观测到 CF_2I^+ 碎片, 但在我们的实验中, 没有观测到这种碎片离子产生.

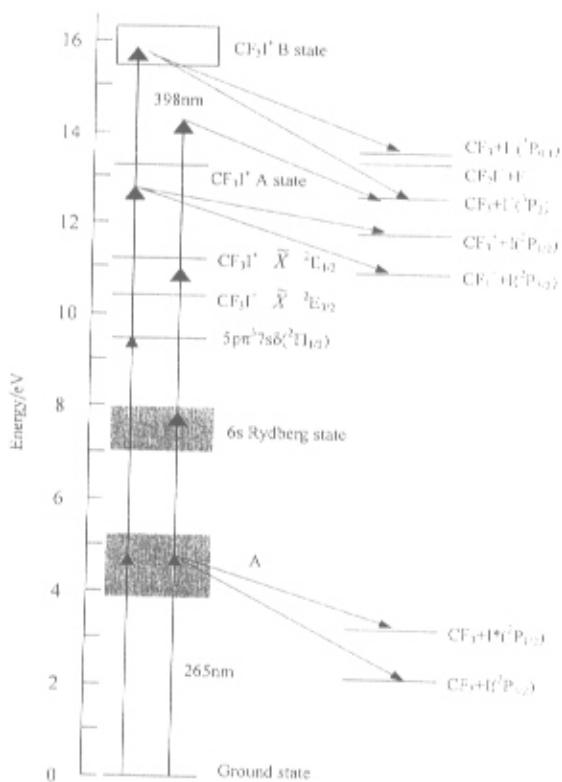


图 3 CF_3I 分子和 CF_3I^+ 相关电子态及碎片通道的能级简图

Fig. 3 The energy level diagram for the relevant electronic states of CF_3I , CF_3I^+ and fragmental channels

从我们泵浦-探测的实验结果(图 2)来看, CF_3I^+ 的信号强度随泵浦-探测延迟时间的改变是一

个快速衰减过程,寿命衰减常数为 96 fs. 若把观测到的 CF_3I^+ 归属为 $(1+2')$ 激发过程, 265 nm 单光子吸收将 CF_3I 分子激发到 A 带, 由于 A 带的排斥特性, CF_3I^+ 信号强度随泵浦-探测延迟时间的改变应该是一个快速衰减过程, 这与我们的实验观测相符. 265 nm 双光子吸收将 CF_3I 分子激发到 $5p\pi^37s\delta$ ($^2\Pi_{1/2}$) 里德伯态. 这是个长寿命态^[15 21 22], 从这个里德伯态上再吸收一个探测光子的 $(2+1')$ 激发过程可以产生 CF_3^+ , 再吸收两个探测光子的 $(2+2')$ 激发过程可以产生 I^+ , 正是由于这个里德伯态的长寿命特性, 我们在实验中观测到 CF_3^+ 和 I^+ 在较长的泵浦-探测延迟时间下仍旧有较强的信号.

对于 CF_3^+ 和 I^+ 信号强度随泵浦-探测延迟时间变化曲线的峰值最大位置相对于 CF_3I^+ 变化曲线的峰值最大位置向正的延迟方向的漂移, 我们的解释分别基于下面的模型. 对于 CF_3^+ 峰值的漂移, 认为主要是由于 CF_3I 分子吸收两个 265 nm 光子激发到 $5p\pi^37s\delta$ ($^2\Pi_{1/2}$) 里德伯态后, 发生了一个较小的构型变化, 这一弛豫过程的发生更有利于母分子电离并解离产生碎片离子. 但是这一新的构型似乎又不稳定, 导致 CF_3^+ 以 (198 ± 13) fs 的寿命快速衰减至峰值信号的 15% 左右. 而 I^+ 峰值位置的漂移除了受 $5p\pi^37s\delta$ ($^2\Pi_{1/2}$) 里德伯态这一弛豫过程的影响外, 主要是由于 bound-free-bound 激发过程. 即 265 nm 单光子吸收将 CF_3I 分子由束缚的基态激发到排斥的 A 带, CF_3I 分子在 A 带的解离引起了 C-I 键拉伸, 使 CF_3I 分子吸收一个探测光子从而共振激发到 CF_3I 分子的 6s 里德伯态几率增强. CF_3I 分子 6s 里德伯态位于 $56700 \sim 64000 \text{ cm}^{-1}$, 由于碘原子的自旋-轨道耦合, 这一里德伯态分裂为 \tilde{C} 态和 \tilde{D} 态^[17]. CF_3I 分子吸收单光子 265 nm 泵浦光与 398 nm 探测光(总能量为 62860 cm^{-1})后, 共振激发到位于 $62500 \sim 62918 \text{ cm}^{-1}$ 的 \tilde{D} 态^[20], 从 \tilde{D} 态上再吸收两个探测光子使得 CF_3I 分子电离并解离产生 I^+ 和 CF_3 . 即 I^+ 可以来自 $(1+1'+2')$ 激发过程. 实验中观测到 I^+ 质谱峰随泵浦-探测延迟时间在双峰与单峰之间演化的现象. 我们认为在 180 ~ 360 fs 这个延迟时间范围内, I^+ 主要来自 $(1+1'+2')$ 激发过程. 由于 $(1+1')$ 吸收过程与 CF_3I 分子 \tilde{D} 态的强烈共振增强, 使得 I^+ 信号在这一时间范围内表现为单峰, 而在其余时间范围 $(2+2')$ 激发过程对 I^+ 信号的贡献是主要的. 在这些时间范围, I^+ 的质谱劈裂为

双峰的机理还有待于进一步研究. 随后的光电子能谱实验研究将为 CF_3I 分子的多光子电离-解离动力学提供更多的信息.

4 结 论

飞秒双色时间分辨质谱实验结果表明, 在飞秒脉冲激光的激发下, 265 nm 单光子吸收将 CF_3I 分子共振激发到 A 带, 处于 A 带的 CF_3I 分子既可以吸收两个探测光子电离产生 CF_3I^+ , 也可以在解离过程中吸收一个探测光子共振激发到 \tilde{D} 态后, 再吸收两个探测光子电离-解离产生 I^+ . A 带的排斥特性使我们观测到 CF_3I^+ 信号的快速衰减过程. 265 nm 双光子吸收将 CF_3I 分子共振激发到长寿命的 $5p\pi^37s\delta$ ($^2\Pi_{1/2}$) 里德伯态, 这一里德伯态在退激发过程中会发生一个快速弛豫, 之后又吸收一个或两个探测光子电离-解离产生 CF_3^+ 或 I^+ . 即 CF_3I^+ 主要来自 $(1+2')$ 激发过程, CF_3^+ 主要来自 $(2+1')$ 激发过程, 而 I^+ 可以来自 $(2+2')$ 和 $(1+1'+2')$ 激发过程. 观测到的实验现象是这些激发过程竞争和叠加的结果. 这些实验结果为进一步研究 CF_3I 分子的电离-解离动力学提供了有用的信息.

致谢:感谢韩登龙老师和徐大力老师在实验上的支持.

参 考 文 献

- [1] Wang P G, Zhang Y P, Ruggles C J, *et al.* *J. Chem. Phys.*, 1990, **92**: 2806
- [2] Xie J, Sha G, Zhang X, *et al.* *Chem. Phys. Lett.*, 1985, **124**: 99
- [3] Waller I M, Hepburn J W. *J. Chem. Phys.*, 1987, **87**: 3261
- [4] Van Veen G N A, Baller T, De Vries A E, Shapiro M. *Chem. Phys.*, 1985, **93**: 277
- [5] Mulliken R S. *J. Chem. Phys.*, 1940, **8**: 382
- [6] Gedanken A. *Chem. Phys. Lett.*, 1987, **137**: 462
- [7] Peter Felder. *Chem. Phys.*, 1991, **155**: 435
- [8] Clary D C. *J. Chem. Phys.*, 1986, **84**: 4288
- [9] Hennig S, Engel V, Schinke R. *J. Chem. Phys.*, 1986, **84**: 5444
- [10] Peter Felder. *Chem. Phys.*, 1990, **143**: 141
- [11] Kim Y S, Kang W K, Jung K H. *J. Chem. Phys.*, 1996, **105**: 551
- [12] Hwang H J, El-Sayed M A. *J. Phys. Chem.*, 1992, **96**: 8728

- [13] Kang W K , Jung K W , Kim D C , Jung K H. *J. Chem. Phys.* ,1996 ,**104** :5815
- [14] Peter Felder. *Chem. Phys. Lett.* ,1992 ,**197** :425
- [15] Sutcliffe L H , Walsh A D. *Trans. Faraday Soc.* ,1961 ,**57** :873
- [16] Herzberg G. *Discuss Faraday Soc.* ,1963 ,**35** :7
- [17] Taatjes C A , Mastenbroek Johanna W G , Hoek Ger van den , Snijders Jaap G , Stolte S. *J. Chem. Phys.* ,1993 ,**98** :4355
- [18] Taatjes C A , Mastenbroek Johanna W G , Stolte S. *Chem. Phys. Lett.* ,1993 ,**216** :100
- [19] Hoek G van den , Jonker M , Parker D H , Taatjes C A , Stolte S. *Chem. Phys. Lett.* ,1993 ,**215** :461
- [20] Hoek G van den , Thoman Jr J W , Chandler D W , Stolte S. *Chem. Phys. Lett.* ,1992 ,**188** :413
- [21] Roeterdink W G , Janssen M H M. *Chem. Phys. Lett.* , 2001 ,**345** :72
- [22] Roeterdink W G , Janssen M H M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* ,2002 ,**4** :601
- [23] Yin S H , Liu H P , Zhang J Y , Jiang B , Xu D L , Wang L , Sha G H , Lou N Q. *Chem. Phys. Lett.* ,2002 ,**356** :227
- [24] Liu Hongping (刘红平) , Yin Shuhui (尹淑慧) , Zhang Jianyang (张建阳) , Jiang Bo (姜波) , Wang Li (王利) , Lou Nanquan (楼南泉). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报) ,2002 ,**15** :213
- [25] Freudenberg Th , Stert V , Radloff W , Ringling J , *et al.* *Chem. Phys. Lett.* ,1997 ,**269** :523
- [26] Waits L D , Horwitz R J , Daniel R G , Guest J A. *J. Chem. Phys.* ,1992 ,**97** :7263
- [27] Low K G , Hampton P D , Powis I. *Chem. Phys.* ,1985 ,**100** :401