

弯曲振动对 CS_2 分子 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态预解离寿命的影响*

郭颖, 徐海峰, 李奇峰, 石勇, 戴静华, 刘世林**, 马兴孝

(中国科学院选键化学开放研究实验室, 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

摘要: 在 209.5 ~ 216 nm 采用光解碎片激发 (PHOFEX) 谱技术, 对 CS_2 分子 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态预解离寿命进行了考察. 测量在超声射流中进行. 信号来自解离碎片 $\text{CS}(A ^1\Pi, v' = 0 \leftarrow X ^1\Sigma^+, v'' = 0)$ Q 支带头的激光诱导荧光 (LIF). 预解离寿命是通过拟合谱带进行拟合来提取的. 拟合中假定基态转动布居为 Boltzmann 分布, 寿命加宽的转动谱线为 Lorentz 线形. 通过拟合共获得 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态 13 个跃迁所对应的预解离寿命, 其中 6 个数据是新得到的. 结果表明, 基态振动角动量量子数 l 或激发态转动角量子数 K ($K = l$) 对预解离寿命有明显的影响. 对于激发态的同一振动能级, 较大的 K 对应于较短的预解离寿命. 实验中采用可加热的射流喷嘴, 用以提高热带激发的强度, 以改善对较大转动角量子数 K 的影响的考察.

关键词: PHOFEX 谱; 预解离寿命; 喷嘴加热

中图分类号: O643, O644 文献标识码: A

Effect of Vibrational Angular Momentum on the Lifetime of CS_2 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ State*

Guo Ying, Xu Haifeng, Li Qifeng, Shi Yong, Dai Jinhua, Liu Shilin**, Ma Xingxiao

(Open Laboratory of Bond Selective Chemistry, Department of Chemical Physics,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

Abstract Predissociation lifetimes of totally 13 vibrational levels in the $^1\text{B}_2$ state of jet-cooled CS_2 have been determined by simulating the rotational band contours of the PHOFEX spectrum in the range of 209.5 ~ 216 nm, where the PHOFEX spectrum was obtained by monitoring the laser-induced fluorescence of CS fragment via the Q band head excitation of $(A ^1\Pi, v' = 0 \leftarrow X ^1\Sigma^+, v'' = 0)$ transition. In order to investigate the influence of vibrational angular momentum quantum number K of the excited $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ state, the nozzle was heated to increase the hot-band transition intensities. The results indicate that, for levels with the same vibrational quantum number but different K numbers in the $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ state of CS_2 , the lifetime decreases with the increasing of quantum number K , suggesting that the dissociation could be accelerated by K number.

Keywords PHOFEX spectrum, Predissociation lifetime, Hot-band transition

1 引言

CS_2 分子 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态是一个典型的预解离态.

前人通过吸收光谱^[1-3]、REMPI 光谱^[4,5]、LIF 光谱^[6,7]等的研究, 指出 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+) \leftarrow X(^1\Sigma_g^+)$ 跃迁为平行跃迁, 且 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态带 (origin) 位于

* Project supported by the National Science Foundation of China (20273063) and the State Key Development Program for Basic Research of China (1999075304).

** Corresponding author, Email: slliu@ustc.edu.cn Received 4 November 2003; in final form 4 March 2004.

46248.7 cm^{-1} , 平衡键角为 153° , C-S 键长为 1.66 Å, 对称伸缩振动频率为 392 cm^{-1} , 弯曲振动频率为 426 cm^{-1} , 反对称伸缩振动频率为 1567 cm^{-1} , 并且指出该电子态在 200 ~ 204 nm 附近存在分子从弯曲到直线构形的势垒^[2,7,8]. 研究表明, CS_2 分子 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态在势垒附近解离的产物主要为 $\text{CS}(^1\Sigma^+) + \text{S}(^3\text{P}_1)$ 和 $\text{CS}(^1\Sigma^+) + \text{S}(^1\text{D}_2)$. 大量的工作对 CS_2 分子 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态光解离动力学展开了研究, 获得了诸如解离的通道分支比^[9-15]、产物的能量分配^[9,10,13] 以及预解离寿命^[5,6,15-20] 等信息. 其中预解离寿命的研究受到广泛关注. 最早的工作开始于 Hara 和 Phillips 在 200 ~ 216 nm 的荧光量子产率和辐射寿命测量^[6]. 随后人们采用共振 Raman 光谱退偏振^[16,17]、振动峰形拟合^[5,15,18], 以及飞秒激光 pump-probe^[19,20] 等方法测量了 194 ~ 220 nm 的 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态多个振动能级的预解离寿命. 这些研究结果表明, 随着 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态振动能级能量的增加, 预解离寿命呈减小的趋势, 并且在接近 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态线形势垒时寿命趋于一定值.

Hepburn 等人的研究还发现^[5,15], 对于 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态上同一振动能级而言, $(K=1) \leftarrow (v_2''=1, l=1)$, $(K=2) \leftarrow (v_2''=2, l=2)$ 跃迁同 $(K=0) \leftarrow (v_2''=0, l=0)$ 跃迁相比有着更短的预解离寿命, 或者说有更快的预解离速率. 这一事实提示, 要么大的 K (或者基态振动角动量 l) 有利于发生预解离, 要么大的 v_2'' 有利于发生预解离, 要么两者均对预解离的发生起作用. 尽管 Hepburn 等认为 $K (=l)$ 起主要作用, 但从逻辑上, 还需要排除 v_2'' 的影响. 为了进一步弄清这一问题, 需要更加谨慎的数据分析和更全面的预解离寿命数据. 例如, 比较 $(K=0) \leftarrow (v_2''=2, l=0)$ 与 $(K=0) \leftarrow (v_2''=0, l=0)$ 激发对应的预解离寿命, 可以明确地判断 v_2'' 的影响, 因为两者均属 $K=l=0$. 另一方面, 比较 $(K=0) \leftarrow (v_2''=2, l=0)$ 与 $(K=2) \leftarrow (v_2''=2, l=2)$, 则可明确判断 $K (=l)$ 的作用, 因为两者都是 $v_2''=2$. 如此等等. 这正是本工作的主旨之一.

由于 $K = l \leq v_2''$, 所以, 为了比较不同 $K (=l)$ 和 v_2'' 的影响, 我们需要增大 PHOFEX 谱的热带强度, 这意味着需要提高 CS_2 分子在基电子态上弯曲振动模的热布居. 对此, 一种简便的办法是升高气体样品的温度.

实验在超声射流条件下进行. 为了增大 CS_2 分

子的振动热布居, 实验中采用了可加热的射流喷嘴. PHOFEX 谱中, 碎片选择 CS. 碎片的示踪来自 $\text{CS}(^1\Pi, v'=0 \leftarrow X^1\Sigma^+, v''=0)$ Q 支带头激发(激发波长固定在 257.6 nm)所产生的荧光(LIF)信号. 假定 CS_2 基态转动布居为 Boltzmann 分布(含 T_R), 转动谱线为寿命加宽引起的 Lorentz 线形(含半高全宽 $\Gamma = 1/2\pi\tau$, τ 为预解离寿命), 通过 CS_2 PHOFEX 子谱带的拟合, 获得相应能级的预解离寿命.

2 实 验

实验装置主要由脉冲射流腔体、脉冲激光光源和信号采集三部分所组成, 三者的时序由脉冲发生器(DG535, Stanford Research Systems)控制^[21].

含 5% CS_2 的 CS_2/He 混合气在配气装置中混合均匀, 并于进入喷嘴时加热到约 130°C . 混合气滞止压强为 $1 \times 10^5 \text{ Pa}$. 脉冲喷嘴(General Valve)喉道直径为 0.5 mm. 气束方向与光路垂直. 真空系统由两台直联机械泵(抽速 15 L/s, 2XZ-15D 型, 成都国投南光)和两台涡轮分子泵(抽速 1500 L/s, F-400 型, 成都国投南光)组成. 进气时的动态真空度为 0.3 mPa, 不进气时的静态真空度为 $2 \times 10^{-5} \text{ Pa}$.

激光光源系统由一台 Nd:YAG 激光器(Lab-190 型, Spectra Physics)输出的线偏振三倍频激光(355 nm, 90 mJ/pulse)同时泵浦两台染料激光器组成. 其中一台染料激光器(PRSC-LG-18 型, Sirah)的输出经 BBO 晶体倍频作为光解光, 用以将射流冷却的 CS_2 分子激发至 $^1\text{B}_2(^1\Sigma_u^+)$ 态. 光解光波长扫描为 209.5 ~ 216 nm, 脉冲能量为 50 ~ 100 μJ . 另一台染料激光器(PRSC-LG-24 型, Sirah)的输出经 BBO 或 $\text{KD}^* \text{P}$ 晶体倍频后, 作为探测光, 与光解光相向进入腔体, 探测光波长固定在解离碎片 $\text{CS}(^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+)$ (0,0) 振动跃迁带 Q 支带头处(257.6 nm), 脉冲能量约 100 μJ . 探测光在空间上与光解光严格重合, 时间上约有 40 ns 的光程延迟. 扫描的同时, 光解光和探测光输出能量分别被两个光二极管同步监测.

光解产物 CS 所发射的荧光信号由光电倍增管接收(工作电压为 -950 V, R2460 型, Hamamatsu). 光电倍增管输出的信号再经前置放大器(SR240 型, Stanford Research System)放大, 由 Boxcar(SR250 型, Stanford Research System)平均后送入计算机记录储存.

3 结果与分析

3.1 PHOFEX 光谱

实验过程中,我们将探测光波长固定在光解碎片 CS(A¹Π, v' = 0 ← X¹Σ⁺, v'' = 0) 振动跃迁 Q 支带头处,扫描光解光波长,通过检测碎片 CS LIF 强度随光解光激发波长的变化,在 209.5 ~ 216 nm (47732.7 ~ 46296.3 cm⁻¹) 获得了 CS₂ 分子的 PHOFEX 谱,结果如图 1 所示.这一段光谱应归属于 CS₂ 分子的¹B₂(¹Σ_u⁺) ← X(¹Σ_g⁺) 平行跃迁^[11]. 由于激发态的能级结构异常复杂,迄今为止,其光谱项尚无法用一组量子数明确地予以表示,人们只是按能级由低至高的顺序,分别用英文字母 a、b、c、d、... 加以标注. 这样一来,详细的跃迁便表示为(v', K, J')

←(v₁'', v₂'', v₃'', J''). 式中 v' = a、b、c、d、... 进一步,对于吸收谱和激发谱而言,由于 CS₂ 分子在基电子态上 v₁ 和 v₃ 模的热布居趋于零,所涉跃迁实际上均属 v₁' = v₃' = 0, 因而,跃迁实际上简化为(v', K, J') ←(v₂'', J''). 又,选择定则除要求 ΔJ = 0, ±1 (J ≠ 0) 外,还要求激发态转动角量子数 K 必须与基电子态振动角动量量子数 l 相等,故相应跃迁被简单地表示为 K_{v₂''}, 且将 K = 0, 1, 2, 3, ... 分别记为 Σ, Π, Δ, Φ, ... 例如, Δ₂^g 表示 v' = g, K = l = 2, v₂' = 2. 按照上述通用符号,我们对图 1 的 PHOFEX 谱进行了标识,图 1(b) 给出了 46300 ~ 46510 cm⁻¹ 放大的 PHOFEX 谱,对比可见,加热使 Σ₂、Δ₂、Π₃ 谱峰强度有所提高.

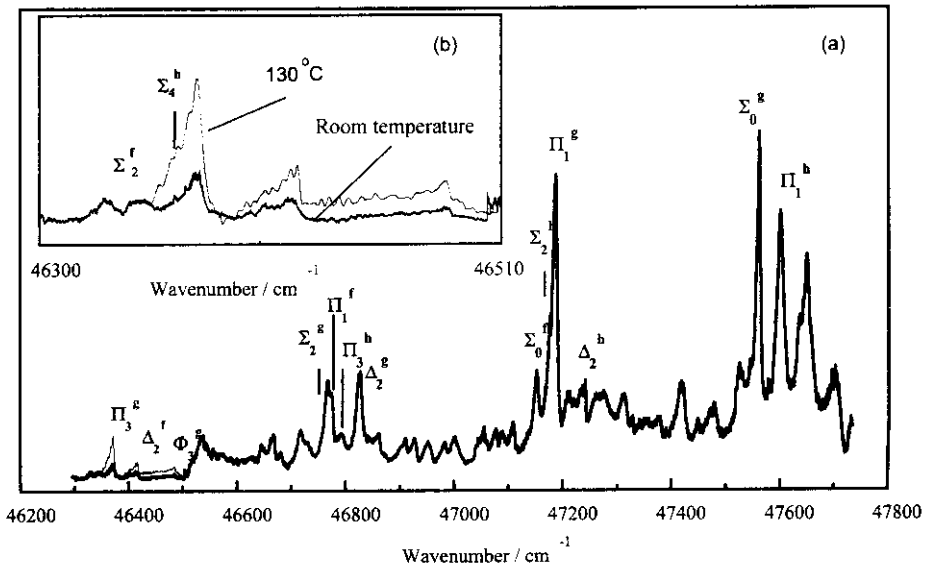


图 1 (a) CS₂ 分子在 47732.7 ~ 46296.3 cm⁻¹ 光解碎片 CS 的 PHOFEX 谱, (b) 46300 ~ 46510 cm⁻¹ 喷嘴加热前后 PHOFEX 谱谱峰强度对比
 Fig. 1 (a) The CS PHOFEX spectrum of CS₂ in 47732.7 ~ 46296.3 cm⁻¹, (b) Comparing of CS PHOFEX spectrum intensity under different temperature condition in 46300 ~ 46510 cm⁻¹

在光谱标识的基础上,根据前人的研究^[5, 15, 18],我们通过转动谱线的加宽拟合 PHOFEX 谱的谱峰轮廓,获得了¹B₂(¹Σ_u⁺) 态预解离寿命的数据. 由于对喷嘴进行加热,增强了源于 v₂' 和 l 热带激发 (Σ₂, Δ₂, Π₃, ... 等) 的信号强度,从而获得更全面的预解离寿命的信息.

3.2 预解离寿命

预解离的存在导致相应辐射跃迁谱线的寿命加宽. 在寿命加宽为主条件下,谱线线宽 Γ 同寿命 τ

的关联为 Γ = 1/2 πτ. 因此,预解离寿命可由谱线线宽的数据求出. 实际上,按已有的工作,寿命 τ 的数量级为皮秒量级,故谱线线宽 Γ 约为 10 cm⁻¹. Γ 远大于 CS₂ 分子¹B₂(¹Σ_u⁺) ← X(¹Σ_g⁺) 激发的转动谱线间隔为 (2B = 0.2 cm⁻¹^[11]) 和激光频宽 (Δν ≤ 0.2 cm⁻¹). 因而,CS₂ 分子的 PHOFEX 谱表现不出其转动结构,更无法测量单一谱线的半高全宽. 解决的办法是仿效文献^[5, 15, 18],由基态转动布居的 Boltzmann 分布和转动谱线的 Lorentz 线形

函数通过计算去拟合所得 PHOFEX 谱 K 子带峰形, 籍以获得待定的转动温度 T_R 和线宽 Γ , 并由 Γ 算出预解离寿命 τ . 由于射流中转动温度低, 转动分布较窄, 以至 P、Q、R 支形成的峰宽与 Γ 相近, 此时, 这种拟合方法特别有效. 作为例证, 图2为 47560 cm^{-1} 附近处 Σ_0^g 激发谱峰的拟合情况, 拟合最优值 T_R 为 30 K , Γ 为 2.53 cm^{-1} , 寿命 τ 为 2.1 ps . 对于略有重叠的谱峰, 如图3所示, 我们则采用多个 Γ 参数

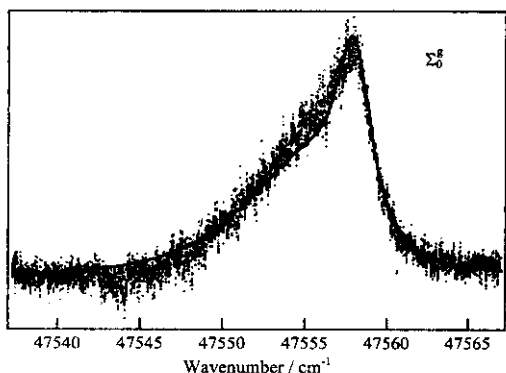


图2 47560 cm^{-1} 附近处 Σ_0^g 激发谱峰拟合

拟合最优值 T 为 30 K , τ 为 2.1 ps . 实线为拟合峰型.

Fig.2 Band contour simulation of Σ_0^g transition around 47560 cm^{-1}

The best-fit results are $T=30\text{ K}$ and $\tau=2.1\text{ ps}$.

The line is the contour simulation result.

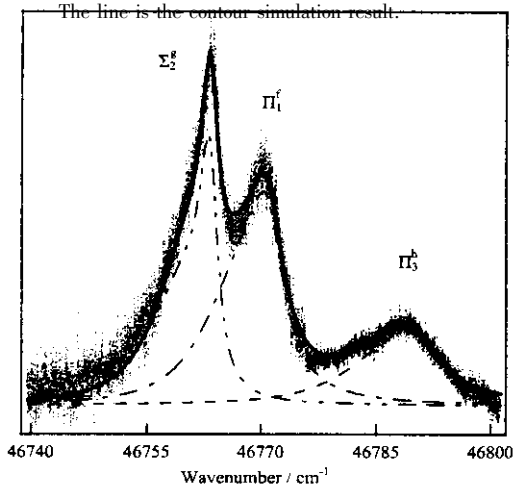


图3 重叠谱峰 Σ_2^g 、 Π_1^f 和 Π_3^b 的拟合

拟合最优值 τ 分别为 2.2 、 1.0 、 0.6 ps , T 为 30 K ,

虚线分别为 Σ_2^g 、 Π_1^f 和 Π_3^b 三个跃迁的拟合,

实线为所有“子峰”拟合结果的叠加.

Fig.3 Simulation of overlapped bands contour composed by Σ_2^g , Π_1^f and Π_3^b

The best-fit results are $\tau=2.2$, 1.0 , 0.6 ps and $T=30\text{ K}$.

The dash is the simulation of each transition,

the thick line is the total contribution of them.

进行拟合, 拟合中, 每个“子峰”对应于一个 Γ 值.

这样, 我们对 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态 f、g、h 三个能级 13 个跃迁对应的谱峰进行了拟合, 获得了各个跃迁对应的预解离寿命, 结果列于表1中. 表中同时给出了 Hepburn 小组在该波段的结果^[5]. 可以看出, 我们的结果与他们的基本吻合. 由于我们的实验是在喷嘴加热的条件下完成的, 因此, 与 Hepburn 等的研究相比, 给出了更多热激发对应的预解离寿命, 从而提供了更为丰富的实验数据来了解不同激发对 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态预解离的影响.

图4给出了表1中数据的图示. 从图4中可以看出, 对于同一个上态能级 v' , 那些 K 相同而 v_2'' 不同的跃迁, 其对应的预解离寿命区别不大, 基本上在误差范围之内, 然而对于那些 v_2'' 相同但 K 不同的跃迁, 如 Σ_2^g 之与 Δ_2^g , Σ_2^h 之与 Δ_2^h , 其对应的预解离寿命则明显不同 ($K=l=2$) 激发对应的寿命明显短于 ($K=l=0$) 激发对应的寿命. 由此可以得出结论, 量子数 K (因而 l) 对 v' 能级的预解离有显著的影响, 大的 K 有利于预解离事件的发生, 而基态振动量子数 v_2'' 对预解离则没有明显的影响 (至少在 $v_2'' \leq 4$ 时是这样).

v_2'' 对激发能级预解离寿命不产生影响这一事实, 说明预解离与 Franck-Condon 激发的初始位形无关, 或者说与激发态上波包的初始位置无关. 这是不难理解的. 按前人的工作和我们获得的数据, 预解离寿命的数量级约为 10^{-12} s , 而激发能级振动周期的数量级为 $10^{-13} \sim 10^{-14}\text{ s}$ (按 $v_2'=426\text{ cm}^{-1}$ 估算), 所以说, 在解离之前, 分子已经过若干周期的振动而过渡到准定态模式, 初始波包位置便显得不重要了.

3.3 K 对 CS_2 分子 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态预解离的作用

已有工作表明^[9-15], $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态预解离有两个主要通道. 按照 Hepburn 等的说法^[15], 两个通道中, 一是 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态同 $^3\Pi$ 排斥态发生自旋-轨道耦合, 由此导致解离产生 $\text{CS}(X^1\Sigma^+) + \text{S}(^3P_1)$ (简称 3P_1 通道), 另一是 $^1\Sigma_u^+$ 与 $^1\Pi$ 排斥态耦合形成弯曲构形的 1B_2 态, 后者沿反对称伸缩振动坐标绝热解离, 生成 $\text{CS}(X^1\Sigma^+) + \text{S}(^1D_2)$ (简称 1D_2 通道). 看来当 $K \neq 0$ 时, CS_2 分子绕分子轴旋转时受离心力的作用, 更易在激发态势能面上过渡到弯曲构形, 同时也更有利于 C-S 键的伸长. 所以, 较大的 K ($=l$) 有助于 CS_2 分子沿 1D_2 通道的解离, 或者说同 3P_1 通道相比, 更有利于 1D_2 通道的解离. 已有工作表明, 大的 K 不

表 1 ¹B₂(¹Σ_u⁺)←X¹Σ_g⁺ 跃迁部分激发对应的预解离寿命.

Table 1 Lifetimes of a part of ¹B₂(¹Σ_u⁺)←X¹Σ_g⁺ transitions.

Vibrational state	Assignment	Position/cm ⁻¹	Lifetime/ps	
			Our work	Ref.[5]
f	Σ ₀ ^f	47147.4	1.3 ± 0.2	1.6 ± 0.2
	Π ₁ ^f	46770.0	1.0 ± 0.15	1.1 ± 0.2
	Δ ₂ ^f	46417.2	0.8 ± 0.1	
g	Σ ₀ ^g	47557.1	2.1 ± 0.2	3.3 ± 0.8
	Σ ₂ ^g	46762.0	2.2 ± 0.2	2.0 ± 0.3
	Π ₁ ^g	47181.3	1.8 ± 0.2	1.9 ± 0.2
	Π ₃ ^g	46374.5	1.6 ± 0.2	
	Δ ₂ ^g	46822.0	1.2 ± 0.2	0.5 ± 0.2
h	Σ ₂ ^h	47169.2	1.8 ± 0.4	
	Σ ₄ ^h	46363.0	1.7 ± 0.4	
	Π ₁ ^h	47596.1	0.5 ± 0.2	
	Π ₃ ^h	46788.9	0.6 ± 0.2	
	Δ ₂ ^h	47230.3	0.5 ± 0.1	1.0 ± 0.2

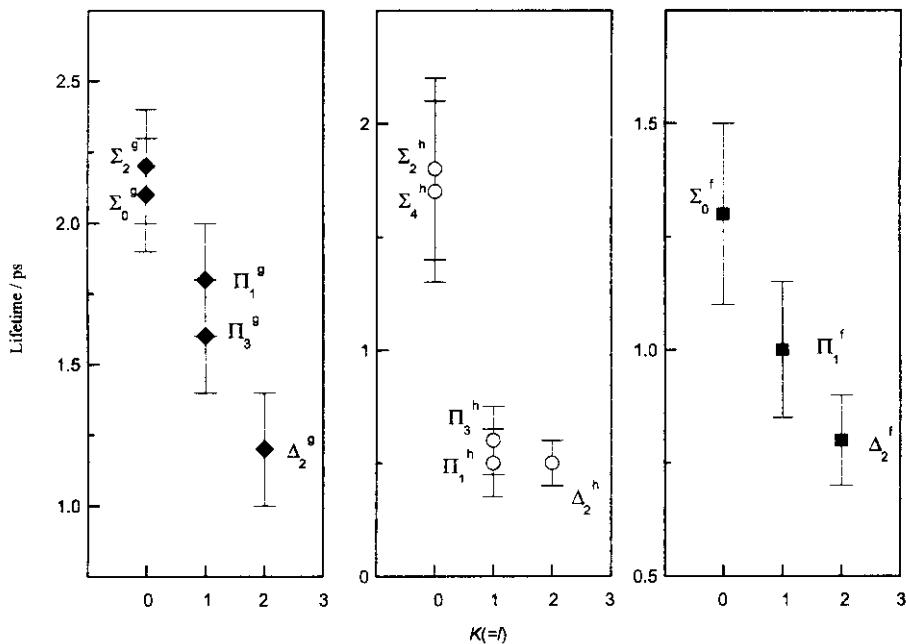


图 4 ¹B₂(¹Σ_u⁺)态 f、g、h 的振动能级 13 个跃迁对应的预解离寿命对 K(= l)作图

◆ 为 g 振动能级, ○ 为 h 振动能级, ■ 为 f 振动能级.

Fig. 4 Plotting lifetimes of 13 ¹B₂(¹Σ_u⁺)←X¹Σ_g⁺ transitions to f、g、h vibrational level of ¹B₂(¹Σ_u⁺) state, vs K(= l)

◆. g vibrational state, ○. h vibrational state, ■. f vibrational state.

仅对应于较短的预解离寿命,也对应于更小的分支比(Σ³P_J)/Σ(¹D₂)¹⁵].

4 结 论

通过拟合 PHOFEX 谱 K 结构谱峰轮廓,获得

了 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ ← $X(^1\Sigma_g^+)$ 跃迁 13 个激发对应的预解离寿命. 由于对喷嘴进行了加热, 获得了比以往工作更多的基态弯曲振动激发和振动角动量激发跃迁对应的解离寿命, 因此, 可以通过基态 v_2'' 不同 $K(=l)$ 相同, 及基态 v_2'' 相同 $K(=l)$ 不同的跃迁对应的解离寿命比较, 来分析基态 v_2'' , $K(=l)$ 分别对 $^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ 态解离速率的影响. 两两对比 Σ_2^h 和 Σ_4^h 、 Σ_0^g 和 Σ_2^g 、 Π_1^g 和 Π_3^g 、 Π_1^h 和 Π_3^h 这一类 $K(=l)$ 相同 v_2'' 不同的跃迁对应的解离寿命, 发现 v_2'' 对解离速率的影响不大. 而对比 Σ_2^g 和 Δ_2^g 、 Σ_2^h 和 Δ_2^h 这类 v_2'' 相同 $K(=l)$ 不同的激发跃迁对应的解离寿命, 则发现随着 $K(=l)$ 的增加, 解离寿命变小, 即解离加快.

参 考 文 献

- [1] Douglas A E , Zanon I . *Can. J. Phys.* , 1964 , **42** : 627
- [2] Hemley R J , Leopold D G , Roebber J L , Vaida V . *J. Chem. Phys.* , 1983 , **79** : 5219
- [3] Roebber J L , Vaida V . *J. Chem. Phys.* , 1985 , **83** : 2748
- [4] Donaldson D J . *J. Chem. Phys.* , 1989 , **91** : 7455
- [5] Beatty A S , Shiell R C , Chang D , Hepburn J W . *J. Chem. Phys.* , 1999 , **110** : 8476
- [6] Hara K , Phillips D . *Trans. Faraday Soc.* , 1978 , **74** : 1441
- [7] Arendt M F , Butler L J . *J. Chem. Phys.* , 1998 , **109** : 7835
- [8] Roebber J L , Vaida V . *J. Chem. Phys.* , 1985 , **83** : 2748
- [9] Yang S C , Freedman A , Kawasaki M , Bersohn R . *J. Chem. Phys.* , 1980 , **72** : 4058
- [10] McGivern W S , Sorkhabi O , Rizvi A H , Suits A G , North S W . *J. Chem. Phys.* , 2000 , **112** : 5301
- [11] Addison M C , Donovan R J , Fotakis C . *Chem. Phys. Lett.* , 1980 , **74** : 58
- [12] Black G , Jusinski L E . *Chem. Phys. Lett.* , 1986 , **124** : 90
- [13] Waller I M , Hepburn J W . *J. Chem. Phys.* , 1987 , **87** : 3261
- [14] Starrs C , Jeco M N , Mank A , Hepburn J W . *J. Phys. Chem.* , 1992 , **96** : 6526
- [15] Mank A , Starrs C , Jeco M N , Hepburn J W . *J. Chem. Phys.* , 1996 , **104** : 3609
- [16] Li B , Myers A B . *J. Chem. Phys.* , 1988 , **89** : 6658
- [17] Li B , Myers A B . *J. Chem. Phys.* , 1991 , **94** : 2458
- [18] Liou H , Dan T P , Hsu T Y , Yang H , Lin H M . *Chem. Phys. Lett.* , 1992 , **192** : 560
- [19] Baronavski A P , Owrutsky J C . *Chem. Phys. Lett.* , 1994 , **221** : 419
- [20] Farmanara P , Stert V , Rodloff W . *J. Chem. Phys.* , 1999 , **111** : 5338
- [21] Guo Ying(郭颖) , Zhou Xiaoguo(周晓国) , Xu Haifeng(徐海峰) , *et. al. Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报) , 2003 , **16** : 435