

## 稠密流体中双原子分子振动弛豫的非谐性及质量效应

丁家强, 陈致英

中国科学院力学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 利用分子动力学计算机模拟方法研究了稠密流体中双原子分子的振动弛豫问题, 证实了双原子分子的振动弛豫速率随着其非谐性的增大而加快, 同时, 其速率也随其质量因子的变大而加速。

**关键词** [分子动力学](#) [稠密态](#) [非谐性效应](#) [质量因子](#)

分类号

## EFFECTS OF ANHARMONICITY AND MASS FACTOR ON MOLECULAR VIBRATIONAL RELAXATION OF DIATOMICS IN CONDENSED STATE

中国科学院力学研究所

### Abstract

In this note, we investigate the effects of anharmonicity and mass for diatomic molecular vibrational relaxation in condensed fluid by computer simulation. We have shown that the rates of vibrational relaxation increase with the increase of anharmonicity and mass factor. This is in agreement with the data from experiment.

**Key words** [molecular dynamics](#) [condensed state](#) [nonharmonic effect](#) [mass factor](#)

DOI:

通讯作者

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(179KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

#### 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子动力学”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [丁家强](#)
- [陈致英](#)