

凝聚态物质振动-平动能量弛豫过程的分子动力学模拟

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 本文利用分子动力学计算机模拟方法,研究了稠密态双原子分子振动-平动弛豫速率与分子离解能、密度和温度的关系。发现振动弛豫速率随着分子离解能的增高而下降。这一现象与由光谱数据得到的结果是一致的。它可以用振动频率的下降来解释;分子振动弛豫速率随密度增大而加快,在我们所作的范围内,似乎看不到弛豫速率与温度有关。

关键词 [稠密态](#) [振动弛豫](#) [分子动力学](#)

分类号

MELECULAR DYNAMICAL SIMULATION FOR VIBRATIONAL-TRANSLATIONAL ENERGY RELAXATION IN CONDENSED STATE

中国科学院力学研究所

Abstract

本文利用分子动力学计算机模拟方法,研究了稠密态双原子分子振动-平动弛豫速率与分子离解能、密度和温度的关系。发现振动弛豫速率随着分子离解能的增高而下降。这一现象与由光谱数据得到的结果是一致的。它可以用振动频率的下降来解释;分子振动弛豫速率随密度增大而加快,在我们所作的范围内,似乎看不到弛豫速率与温度有关。

Key words [condensed states](#) [vibrational relaxation](#) [molecular dynamics](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(196KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“稠密态” 的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
 - [丁家强](#)
 - [陈致英](#)