

## 温度对激光场中 N<sub>2</sub>、O<sub>2</sub> 分子取向的影响

杨增强<sup>1</sup> 周效信<sup>1,2\*</sup><sup>1</sup> 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070;<sup>2</sup> 兰州重离子加速器国家重点实验室原子核理论研究中心, 兰州 730000)

**摘要** 由刚性转子(rigid rotors)模型出发, 利用伪谱方法求解了含时薛定谔方程, 从理论上研究了双原子 N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子在激光场中的取向(alignment)行为, 讨论了分子与飞秒(fs)激光脉冲作用后, 在无外场情况下出现的周期性取向现象. 计算结果表明, 随着温度的升高, 分子的最大取向程度不断地减小; 在低温时, 随温度减小较快, 当温度升高时, 最大取向程度随温度的变化比较缓慢. 并通过计算角动量分布探讨了产生这种变化的原因.

**关键词:** 激光场, 分子取向, 转动波包

**中图分类号:** O643

## Effect of Temperature on Alignment of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> in Laser Field

YANG, Zeng-Qiang<sup>1</sup> ZHOU, Xiao-Xin<sup>1,2\*</sup><sup>1</sup>College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, P. R. China; <sup>2</sup>Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, P. R. China)

**Abstract** In terms of rigid rotor model, time-dependent Schrödinger equation is solved by using the pseudospectral method, and the alignment behaviors of diatomic molecular N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> are studied in laser field. The evolution of the field-free rotational wave-packet of the molecules after the laser pulse is over has been discussed. The results show that the alignment parameter of the molecules depends on the temperature. Both N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> molecules are better aligned at lower temperature, whereas they are poorly aligned at higher temperature. The behavior can be attributed to the population of the angular moment in the rotational wave-packet of molecules at different temperatures.

**Keywords:** Laser field, Molecular alignment, Rotational wave-packet

分子的一些重要性质与它的取向(alignment)和定向(orientation)行为有关, 如分子的光电离和光离解<sup>[1-2]</sup>、化学反应动力学<sup>[3-7]</sup>、以及分子在强激光场中产生的高次谐波(HHG)<sup>[8-9]</sup>等都与分子的取向和定向行为有密切关系. 因此, 分子的取向和定向行为已成为一个重要研究领域. 有多种方法可以驱动分子的取向和定向行为, 而用激光驱动分子的取向和定向已经成为一种有效的方法<sup>[6]</sup>. 近年来, 对分子取向的研究无论是实验方法<sup>[10-11]</sup>还是理论方法<sup>[12-13]</sup>都有很大的进展. 对于同核双原子分子由于没有固有偶

极矩且对中心的反演对称性, 仅用分子的取向行为就可以描述分子轴随空间变化的性质. 而同核双原子分子在激光场中对某一方向的取向可以通过一个长激光脉冲或者一个短激光脉冲实现. 前者是通过绝热变化而实现的摆态(pendular state), 当脉冲结束以后, 分子的取向就会随之消失; 后者是通过非绝热的演化而实现的, 即所谓的“kick 模型”<sup>[14]</sup>, 即用一个较短的激光脉冲(脉冲宽度远远小于分子的转动周期), 突然给分子一个角动量, 形成一个转动波包, 从而达到取向的目的, 这种方法的优点是当这种泵浦

Received: December 23, 2005; Revised: March 2, 2006. \*Correspondent, E-mail: zhouxx@nwnu.edu.cn; Tel: 0931-7971037.

国家自然科学基金(10274063)和教育部科技研究重点项目(03126)资助

(pump) 脉冲结束后, 分子的取向不会消失, 反而会出现周期性的取向现象, 从而为研究分子的取向性质提供了便利条件, 在目前的泵浦-探测 (pump-probe) 实验<sup>[9, 15]</sup>中被广泛采用. 对于由大量分子组成的系综, 其取向程度如何由  $\langle \cos^2\theta \rangle$  描述, 其中  $\theta$  是激光极化方向与分子轴之间的夹角, 尖括号表示对整个分子系综进行统计平均.

目前, 很多实验和理论<sup>[8-9, 15]</sup>都对 N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子的取向进行研究. 已有的研究表明, N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子在激光驱动下, 取向程度除了与激光强度和脉冲宽度有关外, 还与分子所处的环境温度有关. 一般而言, 在相同的激光强度和脉冲宽度条件下, 温度越低, 其取向程度越好, 但是对于取向程度随温度变化的规律还没有给出定量的结果. 本研究利用一束短激光脉冲与分子刚性转子模型相互作用, 求解 N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子在激光场中的含时薛定谔方程, 研究分子的最大取向程度随温度的变化; 通过分析转动波包的角动量分布, 探讨温度对分子的最大取向程度影响的原因.

## 1 理论模型与计算方法

由于分子有多个自由度, 研究分子与激光场的相互作用, 要比研究原子与激光场相互作用复杂得多, 分子在激光场中的运动应包括分子中电子运动, 分子振动和分子转动. 但对于一个相对较弱的短激光脉冲, 且不发生共振的情况而言, 不会引起分子中电子运动和分子振动的变化, 也就不必考虑分子中电子激发和分子振动激发, 当然也没有电离. 因此, 仅仅考虑分子的转动而忽略其他自由度的运动, 这时, 可以将分子当作刚性转子来处理. 假定分子处在基态, 分子在激光场中的偶极矩为(以下均采用原子单位)

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 + \frac{1}{2} \vec{\alpha} \vec{E}(t) \quad (1)$$

其中  $\vec{\mu}_0$  是分子的固有偶极矩, 上式等号右边的第二项是由于外场而产生的感生偶极矩, 高阶项一般比较小, 已忽略<sup>[16]</sup>.  $\vec{\alpha}$  是一各向异性张量, 有两个主要分量, 分别是平行于分子轴的分量  $\alpha_{\parallel}$  和垂直于分子轴的分量  $\alpha_{\perp}$ ; 但对于线形双原子分子<sup>[7]</sup>, 其  $\alpha_{\parallel} = \alpha_{zz}$ ,  $\alpha_{\perp} = \alpha_{xx} = \alpha_{yy}$  ( $x-y-z$  为固定在分子上的坐标系,  $z$  轴沿分子轴). 用  $\alpha_{\parallel}$  和  $\alpha_{\perp}$  可以将感生偶极矩表示为<sup>[17]</sup>

$$\frac{1}{2} \vec{\alpha} \vec{E}(t) = \frac{1}{2} [\alpha_{\parallel} E(t) \cos\theta \hat{e}_{\parallel} - \alpha_{\perp} E(t) \sin\theta \hat{e}_{\perp}] \quad (2)$$

其中  $\hat{e}_{\parallel}$  和  $\hat{e}_{\perp}$  分别为平行于分子轴和垂直于分子轴的单位矢量.

由量子力学可知, 在激光场中刚性转子的哈密顿量(Hamiltonian)可写为

$$\hat{H}(t) = BJ^2 + V_{\mu}(\theta) + V_{\alpha}(\theta) \quad (3)$$

其中  $B$  是分子转动常数,  $B = \frac{1}{2I}$ ,  $I$  为转动惯量, 而

$$V_{\mu}(\theta) = -\mu_0 E(t) \cos\theta \quad (4)$$

$$V_{\alpha}(\theta) = -E^2(t) (\alpha_{\parallel} \cos^2\theta + \alpha_{\perp} \sin^2\theta) / 2 \quad (5)$$

分别表示激光与分子固有偶极矩和感生偶极矩的相互作用. 对于同核双原子分子, 激光与分子固有偶极矩的作用项  $V_{\mu}(\theta)$  为 0. (3) 式进一步简化为

$$\hat{H}(t) = BJ^2 + V_{\alpha}(\theta) \quad (6)$$

一个刚性转子在激光场中的含时薛定谔方程为

$$i \frac{\partial \Psi(\theta, \varphi, t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \Psi(\theta, \varphi, t) \quad (7)$$

其中  $\varphi$  是分子轴的方位角.

对于一较短的激光脉冲, 不需要直接求解(7)式, 可用所谓的“kick”模型, 即激光脉冲与分子相互作用时, 将分子的转动波函数展开为

$$\Psi(\tau_p) = \exp[-i \int_0^{\tau_p} V_{\alpha}(\theta, t) dt] |\Psi(0)\rangle = \sum_j C_j |JM\rangle \quad (8)$$

其中  $|JM\rangle$  为无外场情况下刚性转子转动态的本征函数,  $\tau_p$  为脉冲宽度.

脉冲结束后, 分子波函数持续自由演化

$$\Psi(t + \tau_p) = \sum_j C_j e^{-iBJ(t+\tau_p)} |JM\rangle \quad (9)$$

对于较长的激光脉冲, 采用伪谱方法<sup>[18-19]</sup>求解(7)式的含时薛定谔方程. 先将算符在球坐标中分裂, 刚性转子的含时波函数可表示为

$$\Psi(\theta, \varphi, t + \Delta t) \approx \exp(-i\hat{H}_0 \Delta t / 2) \times \exp[-i\hat{V}_{\alpha}(\theta, \varphi, t + \Delta t / 2) \Delta t] \times \exp(-i\hat{H}_0 \Delta t / 2) \Psi(\theta, \varphi, t) + O(\Delta t^3) \quad (10)$$

其中  $\hat{H}_0 = BJ^2$ ,  $\hat{H}_0$  只含有动能项,  $\hat{V}_{\alpha}$  只依赖于空间坐标, 该演化过程的误差约在  $\Delta t^3$  量级. (10) 式说明, 波函数从时刻  $t$  到  $t + \Delta t$  的演化分三步:

(i) 波函数  $\Psi(\theta, \varphi, t)$  在  $\hat{H}_0$  张成的能量空间中演化  $\Delta t / 2$  时间:

$$\exp(-i\hat{H}_0 \Delta t / 2) \Psi(\theta, \varphi, t) = \Psi_1(\theta, \varphi, t) \quad (11)$$

(ii) 波函数  $\Psi_1(\theta, \varphi, t)$  回到坐标空间, 在激光与分子的相互作用项  $\hat{V}_{\alpha}$  的作用下演化  $\Delta t$  时间:

$$\exp[-i\hat{V}_{\alpha}(\theta, \varphi, t + \Delta t / 2) \Delta t] \Psi_1(\theta, \varphi, t) = \Psi_2(\theta, \varphi, t) \quad (12)$$

(iii) 波函数  $\Psi_2(\theta, \varphi, t)$  重新返回到  $\hat{H}_0$  张成的能量

空间中再次演化  $\Delta t/2$  的时间:

$$\exp(-i\hat{H}_0\Delta t/2)\Psi_2(\theta,\varphi,t)=\Psi(\theta,\varphi,t+\Delta t) \quad (13)$$

这样不断重复(10)式的演化过程,直到激光脉冲结束为止,就可得到刚性转子的含时波函数,然后在无外场的情况下,含时波函数按(9)式进行演化.

对于同核双原子分子,整个系综分子取向的程度用  $\langle \cos^2\theta \rangle$  描述.首先给出不同态  $|JM\rangle$  的取向平均值:

$$\langle \cos^2\theta \rangle_{JM} = \int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Psi_{JM}(\theta,\varphi,t)|^2 d\varphi \quad (14)$$

再对该系综中处于不同转动态的分子求 Boltzman 统计平均

$$\langle \cos^2\theta \rangle = Q^{-1} \sum_J \exp\left[-\frac{BJ(J+1)}{k_B T}\right] \sum_{M=-J}^J \langle \cos^2\theta \rangle_{JM} \quad (15)$$

其中  $Q$  是配分函数(partition function)

$$Q = \sum_J (2J+1) \exp\left[-\frac{BJ(J+1)}{k_B T}\right] \quad (16)$$

$k_B$  和  $T$  分别是 Boltzman 常数和系综温度.对于一个分子取向分布均匀的系综,即分子没有特殊的取向,  $\langle \cos^2\theta \rangle$  为  $1/3$ .当系综中的分子轴都平行于激光的极化方向时,  $\langle \cos^2\theta \rangle = 1$ ;反之,当分子轴都垂直于激光的极化方向时,  $\langle \cos^2\theta \rangle = 0$ ;当处于其他状态时,  $\langle \cos^2\theta \rangle$  的值介于 0 和 1 之间.

## 2 计算结果与讨论

利用上面的方法,计算了  $N_2$  分子和  $O_2$  分子在激光场中的取向行为.在计算中,采用高斯(Gauss)型激光脉冲:

$$E(t) = E_0 e^{-2\ln 2(t/t_w)^2} \cos\omega t \quad (17)$$

其中  $t_w$  取为 60 fs, 波长 800 nm, 激光强度  $4 \times 10^{13} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ .

对  $N_2$  分子和  $O_2$  分子在几个不同温度下取向的计算结果如图 1 所示,当分子还未与激光作用时,  $N_2$  分子和  $O_2$  分子的取向处于无规则分布,这时  $\langle \cos^2\theta \rangle$  为  $1/3$ ,当激光作用到分子上以后随着时间的推移,  $\langle \cos^2\theta \rangle$  会很快地增加,当达到一最大值后,又会很快地下降,此后呈现周期性变化.其恢复(revival)周期对于  $N_2$  分子和  $O_2$  分子是不同的,  $N_2$  分子的恢复周期大约为 8.36 ps,而  $O_2$  分子的恢复周期比  $N_2$  分子的恢复周期长得多,约为 11.52 ps.这种恢复周期的不同主要来源于转动常数的不同.从理论上说,恢复周期为

$$T_r = \pi / B \quad (18)$$

其中  $B$  为分子转动常数.  $N_2$  分子的转动常数为  $1.998 \text{ cm}^{-1}$ ,而  $O_2$  分子的转动常数为  $1.4456 \text{ cm}^{-1}$ .由(18)式可以计算出  $N_2$  分子和  $O_2$  分子的恢复周期分别为 8.32 ps 和 11.50 ps,与我们的数值计算结果符合得很好.分子系综周期性取向现象的产生是由于激光与分子相互作用后,产生一个由多个转动角动量本征态迭加的相干转动波包,对于转动波包中每个  $|J\rangle$  态其累积相位都有相应的角频率

$$\omega_J = \frac{1}{2} J(J+1) \omega_1 \quad (19)$$

其中  $\omega_1 = 4\pi Bc$  是相位的基频.在波包演化过程中,当分子出现第一次取向之后,转动波包中各个  $|J\rangle$  态之间迅速失相(dephase),从而初次的分子取向现象很快地消失.此后,波包在无外场的环境中自由演化,波包中的各成分开始重相(rephase).由于  $J(J+1)$  对于所有的  $J$  都是偶数,所以所有的角频率都是基频  $\omega_1$  的整数倍,当各个态中的累积相位都达到一定值时,初次的分子取向又会重新形成,这样就形成了转动波包的周期性恢复现象.由图 1 可以看出,

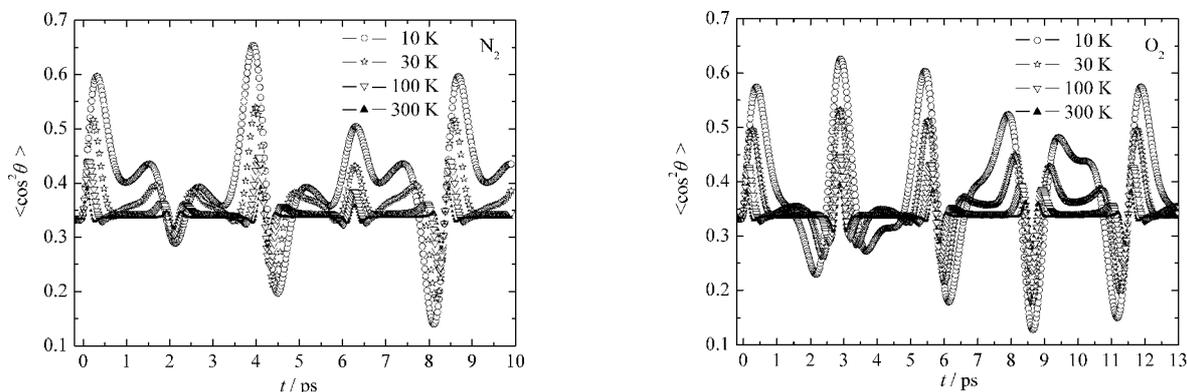


图 1 不同温度下分子取向随时间的变化

Fig.1 Molecular alignment at different temperatures

N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子取向的最大值是不同的, 这种取向最大值的不同, 除了与分子转动常数不同有关外, 还与极化率不同有关.

在  $T_r/4$  和  $3T_r/4$  时, 分子出现的部分恢复和取向相反, 以及在  $T_r/2$  时出现的互相相反的取向行为, 都是由于核自旋的结果<sup>[20]</sup>. 对于同核双原子分子, 必须考虑核自旋统计的影响. 对于核自旋为  $I$  的玻色子 (Bosons), 总波函数在交换两个核时是对称的, 还要计及对称核自旋和反对称核自旋态的统计因子. 对于 N<sub>2</sub>, 核自旋  $I=1$ , 其基态为  $^1\Sigma_g^+$ , 所以偶的  $J$  和奇的  $J$  对应的统计因子分别为  $2/3$  和  $1/3$ . 通过波函数展开后可得

$$\langle \Psi | \cos^2 \theta | \Psi \rangle = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \cdot \sum_{J, J'} C_J^* C_{J'} e^{-i\Delta E_{JJ'}} \langle JM | Y_{20} | J' M \rangle \quad (20)$$

而  $J-J'=\pm 2$ ,  $J$  态和  $J'$  态的相互作用就会产生含时的相位因子  $\cos[-2B(2J+3)t+\phi]$ . 实验上<sup>[11]</sup>已经通过库仑爆炸分子方法, 观察到了拍频现象. 当时间  $t$  是  $T_r$  的整数倍时, 分子就会表现出很好的取向行为. 在时间  $T_r/2$  时, 对于所有奇对称和偶对称的转动态, 它们全部改变符号, 从而有上述现象. 在  $T_r/4$ , 对于所有奇的转动态, 改变符号; 而偶的转动态不变, 又由于 N<sub>2</sub> 统计因子分别为  $1/3$  和  $2/3$ . 所以在  $T_r/4$  和  $3T_r/4$  时, N<sub>2</sub> 分子的取向参数为  $T_r$  时的  $1/3$ . 对于 O<sub>2</sub>, 其基态是  $^3\Sigma_g^-$ , 核自旋  $I=0$ , 从而偶的  $J$  就全部消失, 只有奇的  $J$ , 对应的统计因子为  $1$ , 在  $T_r/4$  和  $3T_r/4$  时, O<sub>2</sub> 分子的取向参数和  $T_r$  时的基本一样.

由图 1 还可以看出, 无论是 N<sub>2</sub> 分子和还是 O<sub>2</sub> 分子取向程度的好坏, 主要是由第一次取向参数  $\langle \cos^2 \theta \rangle$  的最大值 (maximum alignment) 确定. 并且温

度越低, 取向就越好. 但是取向程度随温度的变化并不是呈线性关系变化. 为了确定取向程度随温度的变化规律, 我们在较大的温度范围内对取向参数  $\langle \cos^2 \theta \rangle$  进行了计算和比较.

图 2 给出了分子的第一次取向参数  $\langle \cos^2 \theta \rangle$  的最大值  $\langle \cos^2 \theta \rangle_{\max}$  随温度的变化曲线. 由图可以看出, 对 N<sub>2</sub> 分子和 O<sub>2</sub> 分子而言, 取向程度都随温度的升高而单调减小, 但是减小的快慢是不同的. 当温度在 0 K 到 50 K 之间变化时,  $\langle \cos^2 \theta \rangle_{\max}$  减小得很快; 在 50 K 到 150 K 时,  $\langle \cos^2 \theta \rangle_{\max}$  随温度的升高减小得较慢; 而当温度高于 150 K 时, 温度的变化对  $\langle \cos^2 \theta \rangle_{\max}$  的影响很小; 并且 N<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 分子取向程度随温度变化的趋势稍有差别. 这些差别主要与分子转动常数、极化率的不同有关, 此外, 分子的基态不同也有一定影响. 因为在考虑了核自旋统计的影响后, 不同的分子基态对应不同的核自旋统计因子, 也就造成了 N<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 分子取向程度随温度变化趋势稍有差别. N<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 分子取向程度随温度的升高而减小的这种行为则完全与分子转动态的热分布 (population) 有关. 因此, 有必要给出不同温度下分子转动态的热分布.

图 3 给出了计算结果, 可以明显看出, 温度较低时的转动态分布在较小的角动量范围内, 而当温度升高时, 转动态的角动量分布在较大的范围内, 且温度越高, 起主要贡献的转动态的  $J$  值越大. 因此, 在低温时, 在激光与分子相互作用产生的转动波包中, 多个转动态的角频率相差较小, 且含的转动本征态较少, 容易同步, 使得取向程度较好. 但是当温度增加时, 转动波包中含的转动本征态比低温时多得多, 导致转动态的角频率相差较大, 在这种情况下, 要使系综中的所有分子轴取相同的方向就困难的多, 因此取向程度较差.

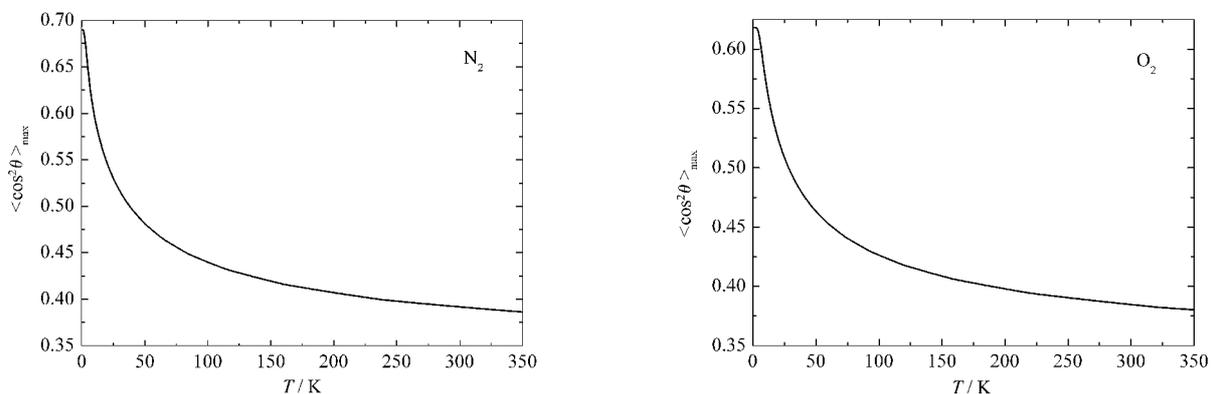


图 2 分子的第一次取向参数  $\langle \cos^2 \theta \rangle$  最大值随温度变化曲线

Fig.2 The first alignment parameter  $\langle \cos^2 \theta \rangle_{\max}$  at different temperatures

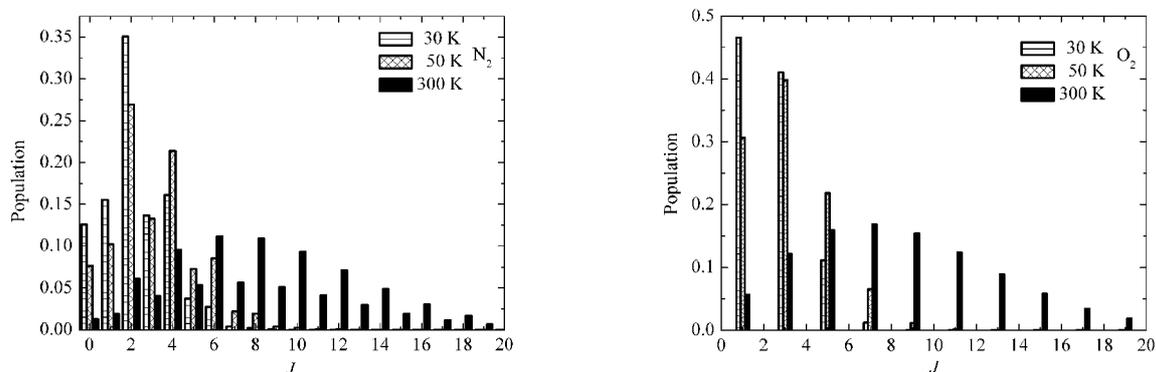


图3 分子转动态的热分布图象

Fig.3 The thermal population of molecular rotational states

### 3 结论

由刚性转子模型出发, 利用伪谱方法, 求解了分子刚性转子模型的含时薛定谔方程, 研究了 N<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 分子在飞秒激光脉冲作用下的取向行为. 当分子与飞秒激光脉冲作用后, 分子在无外场情况下会出现周期性的取向现象, 并且取向程度的好坏与温度有密切关系. 在低温时, 分子的最大取向参数  $\langle \cos^2\theta \rangle_{\max}$  随着温度的升高减小很快; 但随着温度的升高, 这种减小趋于缓慢. 取向参数随温度的变化的原因可以通过分子转动态的热分布给予很好的解释. 由此可以得出, 在温度较低 (<20 K) 的实验中, 只要稍微降低分子系综的温度, 就能很好地改善分子取向程度; 而在高温 (>100 K) 时, 由于转动波包中包含的转动本征态较多, 很难用激光控制的方法实现良好的分子取向.

### References

- Litvinyuk, I. V.; Lee, K. F.; Dooley, P. W.; Rayner, D. M.; Villeneuve, D. M.; Corkum, P. B. *Phys. Rev. Lett.*, **2003**, *90*: 233003
- Seideman, T. *J. Chem. Phys.*, **1995**, *103*: 7887
- Friedrich, B.; Pullman, D. P.; Herschbach, D. R. *J. Phys. Chem.*, **1991**, *95*: 8118
- Cho, V. A.; Bernstein, R. B. *J. Phys. Chem.*, **1991**, *95*: 8129
- Cong, S. L.; Han, K. L.; Lou, N. Q. *Science in China(B)*, **2000**, *30*: 517 [丛书林, 韩克利, 楼南泉. 中国科学 B(*Zhongguo Kexue B*), **2000**, *30*: 517]
- Special issue on stereodynamics of chemical process, *J. Phys. Chem. A*, **1997**, *41*: 101
- Stapelheldt, H.; Seideman, T. *Rev. Mod. Phys.*, **2003**, *75*: 543
- Zhou, X. X.; Tong, X. M.; Zhao, Z. X.; Lin, C. D. *Phys. Rev. A*, **2005**, *72*: 033412
- Itatani, J.; Levesque, J.; Zeidler, D.; Niikura, H.; Pepin, H.; Kieffer, J. C.; Corkum, P. B.; Villeneuve, D. M. *Nature*, **2004**, *432*: 867
- Hering, P.; Cornaggia, C. *Phys. Rev. A*, **1999**, *59*: 2836
- Dooley, P. W.; Litvinyuk, I. V.; Lee, K. F.; Rayner, D. M.; Spanner, M.; Villeneuve, D. M.; Corkum, P. B. *Phys. Rev. A*, **2003**, *68*: 023406
- Friedrich, B.; Herschbach, D. *Phys. Rev. Lett.*, **1995**, *74*: 4623
- Dion, C. M. *Phys. Rev. A*, **2002**, *65*: 063408
- Machholm, M.; Henriksen, N. E. *Phys. Rev. Lett.*, **2001**, *87*: 193001
- Zhao, Z. X.; Tong, X. M.; Lin, C. D. *Phys. Rev. A*, **2003**, *67*: 043404
- Atkins, P. W. *Quanta a handbook of concepts*. Trans. Wang, Z. X.; Pan, Q. Y.; Wang, Z. Q. Beijing: Science Press, 1986:323 [量子物质结构概念手册. 王作新, 潘强余, 王作庆译. 北京: 科学出版社, 1986:323]
- Wang, G. W. *Introduction to atomic and molecular spectrum*. Beijing: Peking University Press, 1983:148 [王国文. 原子与分子光谱导论. 北京: 北京大学出版社, 1983:148]
- Tong, X. M.; Chu, S. I. *Chem. Phys.*, **1997**, *217*: 1191
- Zhang, H.; Han, K. L.; Zhao, Y.; He, G. Z.; Lou, N. Q. *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, *271*: 204
- Herzberg, D. G. *Molecular spectra and molecular structure. I: Spectra of diatomic molecules*. Trans. Wang, D. C. Beijing: Science Press, 1983:96 [分子光谱与分子结构. 第一卷: 双原子分子光谱. 王鼎昌译. 北京: 科学出版社, 1983:96]