

分子间散射问题的李代数处理

关于 AB + CD 系统的振动-振动能量传递

易希璋* 丁世良 马 力

(山东大学光学系) (山东师范大学教育系)

燕子杰 邓从豪

(山东大学化学系)

采用半经典近似方法所给出的关于 AB + CD 散射系统的相互作用势，构造系统的一类动力学代数 h_{12} ，利用这种代数计算了在非反应情况下系统的跃迁几率及势能的统计平均值，并在群参量的一次近似下探讨了跃迁过程中的选择定则。

分子之间散射问题的李代数处理方法是由 Alhassid 和 Levine 首先提出的^[1]。利用这种方法可以同时得到相应散射系统的波函数 $\psi(t)$ 及统计力学量。它与通常的近似方法相比较的优点是在原则上可以给出系统的精确解^[1]而且在某些情况下当采用通常的方法存在困难时这种方法仍然是很有效的^[1-3]，因此可以认为它是对通常计算方法的一种补充。这种方法的缺点是对于某些给定的散射系统很难找出相应的动力学代数，并且当进一步利用这种代数导出 $G(t, t_0)$ 矩阵的矩阵元时很难得到它们的封闭形式^[1]。

Zelechow 等采用半经典近似方法并在分子的振动坐标的二次近似下探讨了散射系统 AB + CD 的振动-振动能量传递问题^[4]。这时系统的哈密顿量算符为

$$H = H_0^{(AB)} + H_0^{(CD)} + V \quad (1.1)$$

$$H_0^{(AB)} = \frac{1}{2\mu_1} (P_1^2 + \mu_1^2 \omega_1^2 Y_1^2), \quad H_0^{(CD)} = \frac{1}{2\mu_2} (P_2^2 + \mu_2^2 \omega_2^2 Y_2^2) \quad (1.2)$$

$$V = A(t) \left\{ \frac{r_1}{L} Y_1 + \frac{r_2}{L} Y_2 + \frac{r_1^2}{2L^2} Y_1^2 + \frac{r_2^2}{2L^2} Y_2^2 + \frac{r_1 r_2}{L^2} Y_1 Y_2 \right\} \quad (1.3)$$

其中 $H_0^{(AB)}$ 与 $H_0^{(CD)}$ 分别表示分子 AB 与 CD 的哈密顿量算符， V 表示相互作用哈密顿量算符。 Y_1 与 Y_2 分别是 AB 与 CD 的振动坐标算符， P_1 与 P_2 是同坐标共轭的动量算符。 ω_1 、 ω_2 分别为 AB、CD 的振动角频率。 $r_1 = m_A/(m_A + m_B)$ ， $r_2 = m_D/(m_C + m_D)$ ， $\mu_1 = m_A m_B / (m_A + m_B)$ ， $\mu_2 = m_C m_D / (m_C + m_D)$ 。 m_A, \dots 分别表示原子 A, ... 的质量。 L 是一种具有长度量纲的参数。 $A(t) = E_0 \operatorname{sech}^2(v_0 t / 2L)$ 表示 CD 的经典轨道。其中 v_0 与 $E_0 = \frac{1}{2} \bar{m} v_0^2$ 分别表示 CD

1988年10月19日收到初稿，1989年9月10日收到修改稿。

的初始速度与动能。 $\bar{m} = (m_A + m_B)(m_C + m_D)/(m_A + m_B + m_C + m_D)$ 。

由于(1.3)中存在着 Y_1 与 Y_2 的相互耦合项： $\frac{r_1 r_2}{L^2} Y_1 Y_2$ ，因此对其求解是困难的。为此 Zelechow 考虑了一种特殊情况^[4]；如果两个分子相互对称，则散射系统成为 $AB + BA$ 。这时 $r_1 = r_2 = r$ ，因此通过简单的坐标变换方法即可消除(1.3)中的坐标耦合项，从而利用通常的分离变量法就可以求解(1.1)。但是这时相应的分子振动频率与时间 t 相关， $\omega = \omega(t)$ 。因此需要处理一种所谓变参数的量子力学问题，这种情况在求解中仍然存在着困难^[5]。

本文将利用 Alhassid-Levine 方法和(1.1)式探讨在一般情况下(非对称)散射系统 $AB + CD$ 的振动-振动能量传递问题。将会看到，在这里并不出现上述的困难。从而对于这种问题的处理充分地显示出李代数方法的优越性。

散射系统的动力学代数

为了导出与散射系统相对应的动力学代数，可引入产生算符 a_i^+ 与湮灭算符 a_i ($i = 1, 2$)^[1]：

$$\begin{aligned} a_i^+ &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{\mu_i \omega_i}{\hbar}} Y_i - i \sqrt{\frac{1}{\hbar \mu_i \omega_i}} P_i \right) \\ a_i &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{\mu_i \omega_i}{\hbar}} Y_i + i \sqrt{\frac{1}{\hbar \mu_i \omega_i}} P_i \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

利用通常的对易关系 $[Y_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}$ 、 $[Y_i, Y_j] = [P_i, P_j] = 0$ ，可导出下列对易关系：

$$[a_i, a_j] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad (2.2)$$

这时(1.2)、(1.3)分别成为（这里已经变换了能量的零点^[1]）

$$H_0^{(AB)} = \hbar \omega_1 a_1^+ a_1 \quad H_0^{(CD)} = \hbar \omega_2 a_2^+ a_2 \quad (2.3)$$

$$V = V_s = \sum_{i=1}^2 \{ s_i^{(2)} (a_i^+ + a_i) + s_i^{(3)} (a_i^{+2} + 2a_i^+ a_i + a_i^2) \} + s^{(4)} (a_1^+ a_2^+ + a_1 a_2 + a_1^+ a_2 + a_1 a_2^+) \quad (2.4)$$

$$s_i^{(2)} = A(t) \frac{r_i}{L} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu_i \omega_i}}, \quad s_i^{(3)} = A(t) \frac{r_i^2}{4L^2} \frac{\hbar}{\mu_i \omega_i}, \quad s^{(4)} = A(t) \frac{r_1 r_2}{2L^2} \frac{\hbar}{\sqrt{\mu_1 \mu_2 \omega_1 \omega_2}}.$$

下标 s 表示 Schrödinger 表象。利用下面公式可将 V_s 变换到相互作用表象：

$$\begin{aligned} V_I &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} V_s e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ &= \sum_{i=1}^2 \{ v_i^{(2)*} a_i^+ + v_i^{(2)} a_i + v_i^{(3)*} a_i^{+2} + 2s_i^{(3)} a_i^+ a_i + v_i^{(3)} a_i^2 \} + \\ &\quad + v_1^{(4)*} a_1^+ a_2^+ + v_1^{(4)} a_1 a_2 + v_2^{(4)*} a_1^+ a_2 + v_2^{(4)} a_1 a_2^+ \\ v_i^{(2)} &= s_i^{(2)} e^{-i\omega_i t}, \quad v_i^{(3)} = s_i^{(3)} e^{-2i\omega_i t}, \\ v_1^{(4)} &= s^{(4)} e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t}, \quad v_2^{(4)} = s^{(4)} e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t} \end{aligned} \quad (2.5)$$

由(2.2)与(2.5)可构成散射系统处于相互作用表象中的动力学代数 h_{15} ：

$$I, a_1^+, a_1, a_2^+, a_2, a_1^+ a_1, a_2^+ a_2, a_1^{+2}, a_1^2, a_2^{+2}, a_2^2, a_1^+ a_2^+, a_1 a_2, a_1^+ a_2, a_2^+ a_1, \quad (2.6)$$

代数元的交换子积为^[6]

$$\begin{aligned} [a_i, a_i^+] &= I, \quad [a_i, a_i^{+2}] = 2a_i^+, \quad [a_i, a_i^+ a_i] = a_i, \quad [a_i^2, a_i^+ a_i] = 2a_i^2, \quad [a_i^2, a_i^{+2}] = 2(I + 2a_i^+ a_i), \\ [a_i^+ a_2, a_1] &= -a_2, \quad [a_1 a_2, a_1^+] = a_2, \quad [a_1^+ a_2, a_1^+ a_1] = -a_1^+ a_2, \quad [a_1 a_2, a_1^+ a_1] = a_1 a_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[a_1^+ a_2, a_2^+] &= -2a_1 a_2, \quad [a_1 a_2, a_1^{+2}] = 2a_1^+ a_2, \quad [a_1^+ a_2, a_2^+] = a_1^+, \quad [a_1 a_2, a_2^+] = a_1, \quad (2.7) \\
[a_1^+ a_2, a_2^+ a_2] &= a_1^+ a_2, \quad [a_1 a_2, a_2^+ a_2] = a_1 a_2, \quad [a_1^+ a_2, a_2^{+2}] = 2a_1^+ a_2^+, \quad [a_1 a_2, a_2^{+2}] = 2a_1 a_2^+, \\
[a_1^+ a_2, a_1 a_2] &= -a_2^2, \quad [a_1^+ a_2, a_1 a_2^+] = a_1^+ a_1 - a_1^+ a_2, \quad [a_1 a_2^+, a_1 a_2] = -a_1^2, \\
[a_1 a_2, a_1^+ a_2^+] &= I + a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2
\end{aligned}$$

其它交换子积为零或可以利用上面的交换子积的厄米共轭得到。由于(2.5)与(2.4)所含有的代数元相同，因此系统处于 Schrödinger 表象中的动力学代数仍是 $h_{15}^{(1)}$ 。对易关系(2.7)表明， h_{15} 中含有下列子代数

$$h_{15} \supset h_6^{(1)} \oplus h_6^{(2)} \supset h_4^{(1)} \oplus h_4^{(2)}, \quad h_6^{(i)} \supset h_4^{(i)}, \quad (i=1,2) \quad (2.8)$$

这里 $h_6^{(i)}$ 的代数元为 $I, a_1^+, a_i, a_i^+ a_i, a_2^+, a_1^2$ 。 $h_4^{(i)}$ 的代数元为 $I, a_2^+, a_i, a_i^+ a_i$ 。 $h_4^{(i)}$ 是谐振子群 H_4 的李代数^[7]。

G(t, t₀) 矩阵与时间进展算符 U(t, t₀)

在相互作用表象中的时间进展算符被定义为^[1]

$$U_I(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{r=1}^{15} u_r A_r \right\} \quad (3.1)$$

A_r 中 A_r ($r=1, 2, \dots, 15$) 表示 h_{15} 中的 15 个代数元 (按照(2.6)中约定的次序)。 u_r 是与代数元 A_r 其相应的群参数。 u_1, u_6 及 u_7 是实数，其它是复数。矩阵 G^I 被定义为^[1]

$$U_I A_r U_I^\dagger = \sum_{s=1}^{15} A_s G_{sr} \quad (3.2)$$

如果仅考虑关于群参数 u_r 的一次近似情况，则有

$$U_I A_r U_I^\dagger = A_r - \frac{i}{\hbar} \sum_{s=2}^{15} u_s [A_s, A_r] = \sum_{s=1}^{15} A_s G_{sr} \quad (3.3)$$

利用(2.7)及(3.3)可以确定 G^I 矩阵。群参数 u_r 满足下列方程

$$\int_{t_0}^t G^I(xu) \dot{u} dx = v \quad (3.4)$$

这里 \dot{u} 表示 u 关于时间 t 的导数。 u 与 v 分别表示分量为 u_1, u_2, \dots, u_{15} 及分量为 0、 $v_1^{(2)*}, v_1^{(2)}, v_2^{(2)*}, v_2^{(2)}, 2s_1^{(3)}, 2s_2^{(3)}, v_1^{(3)*}, v_1^{(3)}, v_2^{(3)*}, v_2^{(3)}, v_1^{(4)*}, v_1^{(4)}, v_2^{(4)*}, v_2^{(4)}$ 的列矢量。非线性方程组(3.4)可以利用迭代方法求解^[8]，为此可将它写成分量形式

$$\begin{aligned}
\dot{u}_1 &= f_1 & u_1^* &= u_1 & \dot{u}_3 &= f_3 + v_1^{(2)} & u_3^* &= u_2 \\
\dot{u}_5 &= f_5 + v_2^{(2)} & u_5^* &= u_4 & \dot{u}_6 &= f_6 + 2s_1^{(3)} & u_6^* &= u_6 \\
\dot{u}_7 &= f_7 + 2s_2^{(3)} & u_7^* &= u_7 & \dot{u}_9 &= f_9 + v_1^{(3)} & u_9^* &= u_8 \\
\dot{u}_{11} &= f_{11} + v_2^{(3)} & u_{11}^* &= u_{10} & \dot{u}_{13} &= f_{13} + v_1^{(4)} & u_{13}^* &= u_{12} \\
\dot{u}_{15} &= f_{15} + v_2^{(4)} & u_{15}^* &= u_{14}
\end{aligned} \quad (3.5)$$

初始条件为^[1]

$$u|_{t=-\infty} = 0 \quad (3.5)'$$

其中 $f_1^* = f_1, f_3^* = f_2, f_5^* = f_4, f_6^* = f_6, f_7^* = f_7, f_9^* = f_8, f_{11}^* = f_{10}, f_{13}^* = f_{12}, f_{15}^* = f_{14}$ 均为 u_1, u_2, \dots, u_{15} 与 $\dot{u}_1, \dot{u}_2, \dots, \dot{u}_{15}$ 的二次函数(表1)。方程组(3.5)的一次近似解为(取 f_1, f_3, \dots

$f_{15} = 0$)

$$\begin{aligned} u_1^{(1)} &= 0, \quad u_3^{(1)} = \int_{-\infty}^t v_1^{(2)} d\tau, \quad u_5^{(1)} = \int_{-\infty}^t v_2^{(2)} d\tau, \quad u_6^{(1)} = \int_{-\infty}^t 2s_1^{(3)} d\tau, \quad u_7^{(1)} = \int_{-\infty}^t 2s_2^{(3)} d\tau, \\ u_9^{(1)} &= \int_{-\infty}^t v_1^{(3)} d\tau, \quad u_{11}^{(1)} = \int_{-\infty}^t v_2^{(3)} d\tau, \quad u_{13}^{(1)} = \int_{-\infty}^t v_1^{(4)} d\tau, \quad u_{15}^{(1)} = \int_{-\infty}^t v_2^{(4)} d\tau \end{aligned} \quad (3.6)$$

二次近似解可将(3.6)代入 f_1, f_3, \dots, f_{15} 中得到。但是计算表明, $|u| \ll \hbar$ 。因此二次近似的结果对一次近似的修正不大。这样可以仅考虑一次近似解。

若令 $a_i |a_i\rangle |n_i\rangle = n |n_i\rangle$ ($i = 1, 2$), 则在群参量的一次近似下从初态 $|n_1\rangle |n_2\rangle$ (相当于 $t = -\infty$) 到态 $|m_1\rangle |m_2\rangle$ (相当于 t) 的跃迁矩阵元为^{[1] [9]}:

$$\langle m_1 | \langle m_2 | U_I(t) | n_2 \rangle | n_1 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_1 t} \left(\delta_{m_1, n_1} \delta_{m_2, n_2} - \frac{i}{\hbar} \delta_{m_2, n_2} U_1 - \frac{i}{\hbar} \delta_{m_1, n_1} U_2 - \frac{i}{\hbar} U_3 \right) \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} U_1 &= u_6 n_1 \delta_{m_1, n_1+1} + u_2 \sqrt{n_1 + 1} \delta_{m_1, n_1+1} + u_3 \sqrt{n_1} \delta_{m_1, n_1-1} + u_8 \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \delta_{m_1, n_1+2} \\ &\quad + u_9 \sqrt{n_1(n_1 - 1)} \delta_{m_1, n_1-2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_2 &= u_7 n_2 \delta_{m_2, n_2+1} + u_4 \sqrt{n_2 + 1} \delta_{m_2, n_2+1} + u_3 \sqrt{n_2} \delta_{m_2, n_2-1} + u_{10} \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)} \delta_{m_2, n_2+2} \\ &\quad + u_{11} \sqrt{n_2(n_2 - 1)} \delta_{m_2, n_2-2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_3 &= u_{12} \sqrt{(n_1 + 1)(n_2 + 1)} \delta_{m_1, n_1+1} \delta_{m_2, n_2+1} + u_{13} \sqrt{n_1 n_2} \delta_{m_1, n_1-1} \delta_{m_2, n_2-1} + \\ &\quad + u_{14} \sqrt{(n_1 + 1)n_2} \delta_{m_1, n_1+1} \delta_{m_2, n_2-1} + u_{15} \sqrt{n_1(n_2 + 1)} \delta_{m_1, n_1-1} \delta_{m_2, n_2+1} \end{aligned}$$

跃迁几率为^[9]

$$P_{n_1, n_2 \rightarrow m_1, m_2} = \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle m_1 | \langle m_2 | U_I(t) | n_2 \rangle | n_1 \rangle|^2 \quad (3.8)$$

系统的初始分布可选为^[1]

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho(t) = \exp \left\{ -\frac{\hbar}{kT} \sum_{i=1}^2 \omega_i a_i^\dagger a_i - \lambda \right\} \quad (3.9)$$

其中 k 是 Boltzmann 常数, T 是系统的初始温度, $\lambda = -\ln \prod_{i=1}^2 (1 - e^{-\hbar \omega_i / kT})$ 为配分函数, $\rho(t)$ 表示密度矩阵算符。这时约束 $\{B_r\}$ ($r = 1, 2, \dots, 15$) 与代数 h_{15} 中的元素 $\{A_r\}$ 重合, 因此成为动力学约束^[1], 其统计平均值满足下列方程^[1]

$$\langle A_r \rangle_G = \langle A_r^{(0)} \rangle \quad (3.10)$$

这里 $\langle A_r^{(0)} \rangle$ 与 $\langle A_r \rangle$ 分别表示分量为 $1, 0, \dots, a_1, a_2$ 及分量为 $\langle A_1 \rangle, \langle A_2 \rangle, \dots, \langle A_{15} \rangle$ 的行矢量。

$a_1 = (1 - e^{-\frac{\hbar \omega_2}{kT}}) \sum_{n_1=1}^{\frac{\hbar \omega_2}{kT}} n_1 e^{-\frac{\hbar \omega_1}{kT} n_1}, a_2 = (1 - e^{-\frac{\hbar \omega_1}{kT}}) \sum_{n_2=1}^{\frac{\hbar \omega_2}{kT}} n_2 e^{-\frac{\hbar \omega_2}{kT} n_2}$ 。线性方程组(3.10)的解已经由计算机给出。

由于任何力学量的算符均可利用代数 h_{15} 的元素来表示, 因此通过(3.10)的解可以计算任何力学量的统计平均值。例如系统势能的平均值为

$$\begin{aligned} \langle V_s \rangle &= \sum_{i=1}^2 \{ s_i^{(2)} (\langle a_i^+ \rangle + \langle a_i^- \rangle) + s_i^{(3)} (\langle a_i^{+2} \rangle + 2 \langle a_i^+ a_i^- \rangle + \langle a_i^2 \rangle) \\ &\quad + s_i^{(4)} (\langle a_1^+ a_2^+ \rangle + \langle a_1^+ a_2^- \rangle + \langle a_1^- a_2^+ \rangle + \langle a_1^- a_2^- \rangle) \} \end{aligned} \quad (3.11)$$

结 果 与 讨 论

(1), 由于群参量 u_1 所对应的算符是单位算符, 它与代数 h_{15} 中其它元素对易. 因此 u_1 仅对系统波函数 $\Psi(t)$ 的相位有贡献而对跃迁几率无贡献.

(2), 计算表明, $|u_r|/\hbar \ll 1$ ($r = 1, 2, \dots, 15$). 因此对于(3.2)与(3.5)所取的近似是合理的.

(3), 显然动力学代数 h_{15} 及由它所导致的结果(如 $P_{n_1, n_2 \rightarrow m_1, m_2}$, $\langle V_s \rangle, \dots$)在所约定的近似下适用于一般的双原子分子-双原子分子散射系统, $AB + CD$. 作为一种应用这里给出了对 $CO + CO$ 散射系统的计算结果. 这时有^[5], $r_1 = 0.43$, $r_2 = 0.57$, $L = 0.21 \times 10^{-8} \text{ cm}$, $\mu_1 = \mu_2 = 11.39 \times 10^{-24} \text{ g}$, $\tilde{m} = 23.36 \times 10^{-24} \text{ g}$, $\omega_1 = \omega_2 = 3.2496 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. 图1表示由(3.11)得到的结果. 这里给出了当 $\alpha = 1, T = 272 \text{ K}$; $\alpha = 5, T = 300 \text{ K}$; $\alpha = 15, T = 500 \text{ K}$ ($v_0 = 10^6 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$) 时 $\langle V_s(t) \rangle$ 随时间 t 的变化曲线. 如果将 $\langle V_s \rangle$ 存在明显变化的时间区域看作两个分子的相互作用区域, 则这种区域将随 α 与 T 的增大而减少. 图2表示利用(3.8)得到的 $P_{0,0 \rightarrow 0,0}$ 与 $P_{0,0 \rightarrow 1,1}$ 随初速 $\alpha(v_0)$ 的变化曲线.

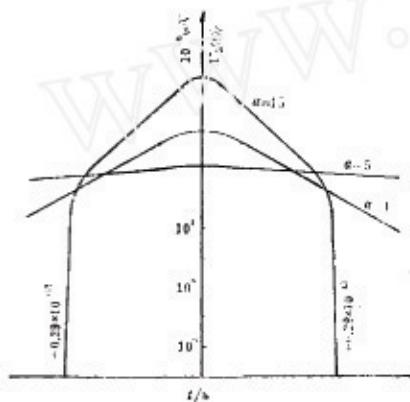


图1 Fig. 1

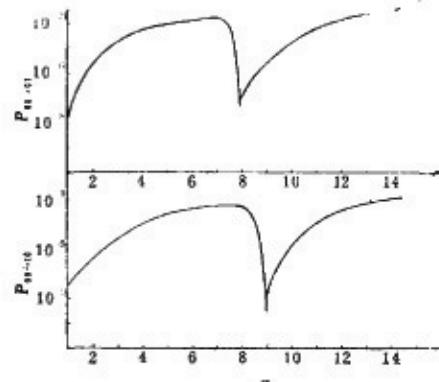


图2 Fig. 2

(4), 由(3.7)容易看出, 仅有下列跃迁是允许的:

$$n, m \rightarrow n+1, m, n-1, m, n, m+1, n, m-1 \quad (\text{i})$$

表1 Table 1

$2ihf_1^{\pm} = -u_3u_2 + u_2u_3 - u_6u_4 + u_4u_6 - u_9u_5 + u_5u_9 - u_{13}u_{10} + u_{10}u_{11} - u_{15}u_{12} - u_{12}u_{13}$
$2ihf_3^{\pm} = -u_8u_1 + u_1u_8 - u_{14}u_4 + u_{12}u_5 + u_2u_6 - u_5u_8 - u_6u_{12} + u_4u_{14}$
$2ihf_5^{\pm} = -u_{13}u_2 + u_{12}u_3 - u_3u_4 + 2u_{13}u_5 + u_4u_7 - 2u_5u_{13} - u_3u_{12} + u_2u_{13}$
$2ihf_6^{\pm} = -4u_3u_4 + 4u_4u_3 - u_{13}u_{12} + u_{12}u_{13} + u_{15}u_{14} - u_{14}u_{15}$
$2ihf_7^{\pm} = -4u_{11}u_{10} + 4u_{10}u_{11} - u_{13}u_{12} + u_{12}u_{13} - u_{16}u_{14} + u_{14}u_{15}$
$2ihf_9^{\pm} = -2u_6u_4 + 2u_4u_6 - u_{14}u_{15} + u_{12}u_{14}$
$2ihf_{11}^{\pm} = -2u_7u_{15} + 2u_{10}u_7 - u_{15}u_{12} + u_{12}u_{15}$
$2ihf_{13}^{\pm} = u_{12}u_6 + u_{12}u_7 - 2u_{15}u_8 - 2u_{14}u_{10} - u_6u_{12} - u_7u_{12} + 2u_{15}u_{14} + 2u_8u_{15}$
$2ihf_{15}^{\pm} = u_{14}u_6 - u_{14}u_7 - 2u_{15}u_8 + 2u_{12}u_{11} - 2u_{11}u_{12} + 2u_8u_{13} - u_6u_{14} + u_7u_{14}$

$n, m \rightarrow n+2, m, n-2, m, n, m+2, n, m-2$ (ii)

$n, m \rightarrow n+1, m+1, n-1, m-1, n-1, m+1, n+1, m-1$ (iii)

但是上述跃迁的选择定则是在群参数 u_r 的一次近似下得到的，向更高能级的跃迁将需要考虑关于群参数更高次近似的结果。

参 考 文 献

- [1] Alhassid, Y. and Levine, R.D., *Phys. Rev.*, 1978, A18, 89.
- [2] Berrondo, M. and Palma, A., *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1980, 13, 783.
- [3] Levine, R.D. and Wulfman, C.E., *Chem. Phys. Lett.*, 1978, 60, 372.
- [4] Zelechow, A., Rapp, D. and Sharp, T.E., *J. Chem. Phys.*, 1968, 49, 286.
- [5] Rapp, D. and Kassal, T., *Chem. Rev.*, 1969, 69, 61.
- [6] Wybourne, B.G., "Classical Groups for Physicists", John Wiley, 1974.
- [7] Sterater, R.F., "The Representations of the Oscillator Groups", *Commun. Math. Phys.*, 1967, 4, 217.
- [8] 李文清, "泛函分析", 科学出版社, pp.240—210, 1960.
- [9] Schweber, S.S., "An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory", New York, pp. 308—330, 1961.

LIE ALGEBRAIC APPROACH TO THE MOLECULAR SCATTERING

Vibration-Vibration Energy Transfer for the System AB + CD

Yi Xizhang^a Ding Shiliang Ma Li

(Shandong University) (Shandong Normal University)

Yan Zijie Deng Conghao

(Shandong University)

ABSTRACT

A dynamic algebraic h_{15} is formed by using the semiclassical potential surface for AB + CD. The V-V energy transfer and the expectation of the potential are calculated; the selection rules are discussed under the first-order approximation of the group parameters.