

现代分子光谱学的进展*

郑一善

(华东师范大学物理系)

摘要——本文综述分子光谱常规分析技术的改进促使快速扫描傅里叶变换分光仪器的发展。随着激光的问世和不用分光计的分析措施的涌现,分子光谱分析运用了许多变革性的测试方法,导致测量精度和分辨本领的迅速提高,从而推动了分子光谱方面的研究工作。鉴于观察现象的实验技术不断地在发展,分子光谱研究领域里所涉及的主要课题也就日新月异。本文仅按当代学者采用的分析技术和所完成的一些研究工作,作简短的综合述评。

一、前言

近年来由于新的测试技术、测试设备和元件、激光技术、低温技术和高灵敏度探测器等的发展,分子光谱的分析及其研究工作步向一个新的阶段。在常规分析方面,多路传输、干涉量度和傅里叶变换技术的采用,使现代红外光谱仪的输出能量和测量精度大大提高。光谱分辨率几乎已不受仪器本身结构的限制,而取决于所研究的媒质内部产生的各种谱线增宽。作为相干光学过程辐射源的激光的问世,使光谱学有了重大的变革。给分子光谱分析和基本研究工作提供了新的活力,使我们的注意力转向新的领域^[1]。这种新技术和许多不用分光计的新措施,将与常规分析方法并肩地作为品质鉴定和动态分子过程研究的工具,进而发展了比六十年代以前更为正确、又较完整的有关分子光谱的理论。本文旨在介绍当前分子光谱分析技术及所进行的研究工作的概况。

二、分子光谱的分析技术

当代分析技术的发展,使分子光谱出现了新的面貌。不久前,传统的红外分光计的最高分辨率可达 0.04 cm^{-1} 。随着分析技术的改进,目前大都已使用快扫描干涉调频红外傅里叶变换分光计(FTS)。由于这种仪器概括了多路传输、干涉量度和傅里叶变换三者的优点,它能把多次扫描的干涉信号累加后平均,然后完成傅里叶变换处理,因而仪器有很高的信噪比。仪器的测试范围一般可遍及紫外直到远红外区。这种仪器的分辨率取决于两束干涉光

本文 1983 年 7 月 13 日收到。

* 1982 年 6 月作者应邀参加在美国渥海渥州立大学召开的第三十七届分子光谱学专题讨论会,并作了大会发言。本文主要系大会讨论内容的综合述评。

之间的光程差 D , 亦即约为干涉仪中移动镜平移距离的两倍: $\delta\nu \approx 1/D$ 。西德 Bruker IFS 115 型红外傅里叶光谱仪的实际可移动的平移距离约为 8.3 cm, 因而它的最高分辨率为 0.06 cm^{-1} 。美国 Denver 大学的 FTS 的移动镜平移距离为 50 cm, 相应的分辨率约为 0.010 cm^{-1} 。在使用氮的 ν_2 谱带校正二极管激光光谱时, 美国国家航空航天局和 Kitt 山顶天文台使用了 McMath 1.00 m 傅里叶变换分光计, 它的分辨率约为 0.0050 cm^{-1} 。加拿大 Bomem 公司报道了他们生产的快扫描 1.25 m 傅里叶变换分光光度计, 它的分辨率可达 0.0040 cm^{-1} 。加拿大国家科学院赫兹堡天文物理所曾用该仪器分析了苯的 ν_{13} 谱带, 分析时移动镜的实际位移为 1.23 m, 观察到的谱线半峰半宽度为 0.0048 cm^{-1} , 经去褶后可达 0.0020 cm^{-1} , 显已低于多普勒增宽限度。它能把密集的转动结构很好地分辨开来。他们在 $1466 \sim 1504 \text{ cm}^{-1}$ 光谱区内测定了 120 多个支谱带。分析结果确定了 ν_{13} 态的许多光谱常数, 其标准偏差为 0.0005 cm^{-1} 。法国 Dijon 分子光谱实验室、Orsay 红外实验室和皮尔-居里大学分子光谱实验室报道了他们分析甲烷 $^{12}\text{CH}_4$ 和 $^{13}\text{CH}_4$ 的 $\nu_3 + \nu_4$ 谱带和氘代甲烷 $^{12}\text{CD}_4$ 和 $^{13}\text{CD}_4$ 的 $10 \mu\text{m}$ 谱带时所用的高分辨率傅里叶变换分光计的分辨率高达 0.0030 cm^{-1} 。他们测定了各态的光谱常数, 标准偏差各为 0.050 及 0.0012 cm^{-1} 。

激光的出现, 使光谱分析技术有了革新。现在可调谐激光源几乎已从真空紫外延伸到远红外-毫米波段。传统的方法是使用分光仪器分析原子或分子的发射或吸收光谱。分辨率受仪器本身结构和能量的限制。通过多路传输、干涉量度和傅里叶变换, 分辨率有所改善, 但几乎已达到了它的上限。光谱分析的另一种方法是不用分光计, 即使用可调谐单色辐射, 扫描所要研究的光谱区, 从而观察原子或分子系统对它的响应。各种可调谐激光器的问世, 在原子和分子光谱领域里形成一些变革性的测试方法, 大大推进了这方面的研究工作。在分子光谱方面, 这就是红外激光光谱学的内容之一。通常线宽常受不均匀的多普勒增宽的限制。在原子或分子媒质内还有谱线的均匀增宽存在, 如自然增宽、洛伦兹碰撞增宽、器壁增宽、瞬时增宽、功率增宽和压力增宽等。激光出现后已有若干方法, 使原子或分子对于单色光激发仅受自然增宽的限制。这种增宽在原子为 $3 \times 10^{-4} \sim 3 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$, 分子为 $3 \times 10^{-8} \sim 3 \times 10^{-10} \text{ cm}^{-1}$ 。通过低温技术, 我们现在已能在冷却系统中陷获单个离子, 如 Ba^+ 或 Mg^+ 。在对它们进行光谱研究时, 除自然增宽外, 其余均将被删除, 使谱线达到前所未有的锐度。终而将使光谱分析的分辨本领从常规的、受多普勒增宽限制的 $10^5 \sim 10^6$ 提高到 10^{11} , 甚至预期可达 $10^{14} \sim 10^{18}$, 为最后的原子时间和长度标准提供探索途径^[3]。

直到现在还没有单独的激光源能在极为广泛的红外区作连续调谐并能保持它的固有线宽不变。通常用于分子光谱分析的激光器有半导体二极管, 它在 $1 \sim 34 \mu\text{m}$ 波段内调谐时至少须换用 $3 \sim 5$ 个管子。它的最高分辨率约为 $3 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ 。此外还有非线性光学器件中的差频辐射源和双光子混频器, 它们的最高分辨率各约为 2×10^{-3} 和 $3 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ 。气体激光器中的塞曼调谐、高压 CO_2 和压电调谐亦曾得到使用, 它们的分辨率可各达 3×10^{-3} 、 3×10^{-2} 和 $3 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ 。与激光二极管不同, 它们的波长调谐范围窄, 是个缺点, 因而我们还得探索其他新技术。

关于不用分光计的其他分子光谱分析技术, 在下节中加以讨论。鉴于观察现象的实验技术和理论推敲连续不断地在发展, 分子光谱研究领域中所涉及的主要课题也就日新月异。本文仅按当代学者所作的工作作简短的介绍, 为我们今后在该方面的研究工作提供参考。

三、分子光谱研究工作的进展

分子光谱的研究工作,一般按电子态、固态、液态、转动分析、振动分析、高分辨率红外及理论、激光光谱、微波波谱、分子束、能量转移及分析技术等分类。现就其中一些主要课题的测试技术及所获成果择要作简短的介绍^[2]。

1. 转动光谱

氢分子(H_2)无偶极转动光谱。它的纯转动四极光谱最先系在1979年从太阳系外猎户星座发射来的 $12.28\mu m$ 光谱的 $S(2)$ 跃迁中探测到。近年来又在该星座中观察到高 J 跃迁 $S(8)$ 、 $S(9)$ 、 $S(12)$ 、 $S(13)$ 、 $S(14)$ 及 $S(15)$ 。美国国家航空航天局等在实验室内用二极管激光分光计记录了分子氢的纯转动光谱。对位在 12.3 、 9.7 、 8.0 及 $6.9\mu m$ 的 $S(2)$ 、 $S(3)$ 、 $S(4)$ 及 $S(5)$ 跃迁各导出其频率及四极强度。据此,随即对先前在猎户星座中探测到的 $S(2)$ 跃迁作频率测量。测定的频率为 814.4250 cm^{-1} ,与来自猎户星座中的观察值相差 -0.027 cm^{-1} 。此外,他们在分析中发现,通常一组转动常数 B 、 D 、及 H 不足以表征直到 $J=7\sim 9$ 为止的 H_2 的基态转动能级。为了使实验室测量结果和来自猎户星座分子云中的高 J 谱线频率相凑合,至少还应加上五个转动常数。

2. 激光磁共振光谱

加拿大国家科学研究委员会赫兹堡天文物理所、素以研究分子自由基闻名于世。他们对早先可见化学发光光谱研究中所指出的、HSO基应在 $1013\pm 5\text{ cm}^{-1}$ 处出现的 ν_3 谱带,用激光磁共振(LMR)法在 $10\mu m$ CO_2 激光区中研究它的振-转光谱。测定了该谱带的许多跃迁,并找到 ν_3 的谱带基线为 1009.36 cm^{-1} 。他们还在较高频率区 $1020\sim 1080\text{ cm}^{-1}$ 之间记录了许多 LMR 线。由于在该区 SO 分子的 LMR 线的存在以及 HSO 的(010)和(001)振动态之间的科里奥利相互作用,使谱线的测定变为繁复。

美国柏克莱加州大学对 HCl^+ 分子离子用远红外激光磁共振技术测量了它的纯转动跃迁和超精细结构。离子通过含有痕量的 HCl (总压强约为 1 Torr) 在氦的腔内放电中产生。在磁感应通量强度直到 20 kGs 下,对 $H^{35}Cl^+$ 、 $H^{37}Cl^+$ 、 $D^{35}Cl^+$ 及 $D^{37}Cl^+$ 同位素都进行测量,并按照 Brown 的 $^2\pi$ 哈密顿函数对光谱进行分析。他们对 HBr^+ 分子离子作了同样的研究。对激光对于磁场为 σ 和 π 偏振的情况下,测量了 $H^{79}Br^+$ 、 $H^{81}Br^+$ 、 $D^{79}Br^+$ 和 $D^{81}Br^+$ 中的 130 多个 LMR 跃迁。这些光谱仍按 Brown 的 $^2\pi$ 哈密顿函数进行理论分析。

3. 差频激光光谱

赫兹堡天文物理所使用氩离子激光和单模染料激光的混合差频激光(DFL)输出、连同一长程塞曼调制放电管、在 $2.9\sim 3.2\mu m$ 区内探测到了 NH_2 的 ν_1 和 ν_3 谱带。他们大约测量了100个振-转跃迁,同时对科里奥利-耦合的 ν_1 和 ν_3 态也作了分析。在记录 NH_2 的同时,还看到了属于NH基的基频谱带跃迁。 NH_2 的振-转谱带对探索星际 NH_2 可能有贡献。

该所使用差频激光在氢的放电中探索到了 HeH^+ 的红外吸收光谱。在类似的实验中,他们观察到 HeH^+ 、 $^{20}NeH^+$ 和 $^{22}NeH^+$ 分子离子 $X^1\Sigma^+$ 态的基频振-转谱带。导出了各别的分子常数 ν_0 、 B_0 、 B_1 和 D_1 ,并指出有可能作 HeH^+ 的天体物理探测。

他们还用差频激光技术观察到甲基 CH_3 的 ν_3 基频谱带($\nu_0=3160.8202\text{ cm}^{-1}$)的吸收光

谱。从 41 个观察到的跃迁的最小二乘方拟合中, 在 $v_3=1$ 态中的分子常数已经测定。在探索星际 CH_3 时, 现有结果可能有用。

该所还使用可调谐差频激光, 观察到 SH 基 ($X^2\pi$) 的红外基频吸收谱带 ($v=1\leftarrow 0$) 和 SO 基 ($X^3\Sigma^-$) 的二次谐波谱带 ($v=3\leftarrow 0$)。他们提供了各该基的分子常数。这些结果说明差频激光技术对探测自由基的基频跃迁以外的弱谐波谱带的效用。

4. 高分辨率激光斯塔克和傅里叶光谱

比利时布鲁塞尔自由大学和赫兹堡天文物理所鉴于位在 $6\mu\text{m}$ 区的 $^{13}\text{O}^{18}\text{O}$ 的 8-7 $P(13)$ 激光线与 D^{79}Br 的 1-0 $P(1)$ 线极为接近的事实, 观察到一个激光斯塔克反转兰姆凹陷光谱, 从而把跃迁的 Br 超精细结构分辨开来。主要是相对于激光线、超精细结构的能量图样使双共振凹陷得以观察到。从分析中得出 $v=1$ 的能级中的偶极矩。他们还记录了与激光斯塔克分析相关联的、准确校正的 DBr 的 1-0 谱带的傅里叶光谱。

5. 光学-光学双共振光谱

美国宾夕法尼亚州立大学用脉冲光学-光学双共振技术, 标定了 $^7\text{Li}_2$ 的 31 个新激发偶态。其中 29 个被证认为三个里德伯系的最低的三个态。里德伯公式对 $^1\pi_g$ 项能量的拟合, 得出 Li_2 的电离电势为 $41496\pm 4\text{ cm}^{-1}$ 。这些态的振动频率、转动常数和离解能的外推, 对于 Li_2 基态的相应各量所作出的估算, 与最初计算结果很符合。

6. 高分辨率激光偏振光谱

美国国家标准局 (NBS) 分子光谱学部与西德 Kaiserslautern 大学通过 $C-X$ 系的高分辨率激光偏振光谱技术, 在铯的二聚物中观察到一个新的激发态 D' -态。在这个 $D^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ 系内的染料激光激发, 得出从 $v''=0$ 到 $v''=140$ 的延伸的荧光谱带列。荧光光谱的分析以及引用 Leory-Bernstein 法测定离解极限时, 获得离解能 $D_0=3648\pm 5\text{ cm}^{-1}$ 。与以往数值相比, 其准确度高二个数量级。

7. 在 $5\sim 10\mu\text{m}$ 区 N_2O 及 H_2O 的新波长标准线

巴黎大学红外实验室用真空中的傅里叶变换分光计测量了约从 $1100\sim 1350\text{ cm}^{-1}$ 的 N_2O 的新波长标准线。它们的准确度为 $(50\sim 150)\times 10^{-6}\text{ cm}^{-1}$ 。 H_2O 谱线在较广泛的范围内取得了同样的准确度。这些首次用高信息技术所测得的数据, 位在实验文献中目前尚缺乏的光谱区内, 应对准确校正激光二极管及傅里叶光谱有用。

8. 高分辨率光伽伐尼技术

当两束波长不同的激光与不同的跃迁相当、且含有共同的居间能级、用来引发空心阴极放电中的阻抗变化时, 则将有结合信号产生。这种气体放电中的感生阻抗变化称为光伽伐尼效应。这种效应对测定及证认光谱以及研究能量转移过程极为有用, 现已发展成为光伽伐尼双共振光谱技术。

日本物理及化学研究所等使用新制成的射频放电光伽伐尼技术对 N_2 的两个里德伯态作高分辨率研究工作。他们用单模染料激光, 以受多普勒限制的 0.05 cm^{-1} 的分辨率研究 Ledbetter 谱带 $c_4(0)^1\Pi_u \leftarrow a''(0)^1\Sigma_g^+$ 和一个新的可见谱带 $c'_5(0)^1\Sigma_g^+ \leftarrow a''(0)^1\Sigma_g^+$ 。还用不受多普勒限制的分辨率分辨开重迭的谱线, 对该两里德伯谱带的转动跃迁测定其正确的波数。对于最低的 $a''(0)^1\Sigma_g^+$ 态的转动及离心常数经分别测定为 $B_0=1.913748(42)\text{ cm}^{-1}$ 及 $D_0=6.088(99)\times 10^{-6}\text{ cm}^{-1}$ 。

美国伯克莱加州大学用染料激光系统 ($490\sim 690\text{ nm}$) 在复合受到限制的空心阴极放电

中研究 $\text{H}_2(i^3\Pi_u-c^3\Pi_g)$ 、 $\text{N}_2(B^3\Pi_g-A^3\Sigma_u)$ 、 $\text{CO}(d^3\Delta_r-a^3\Pi_r)$ 、 $\text{CN}(A^2\Pi-X^2\Sigma^-)$ 的电子光谱和 He^+ 及 Ar^+ 的原子离子光谱。光伽伐尼信号的时间依赖关系, 说明对于离子的光伽伐尼发射有不同的机构。使用连续环形激光, 在 590~640 nm 区观察到 NH_2 的广泛的高分辨率电子光谱。

斯坦福大学对 $\text{HCO} \tilde{A}$ 态预离解作激光光伽伐尼研究。他们用单模染料激光在 $\text{HCO} \tilde{A}^2A''-\tilde{X}^2A'$ 跃迁的 $(0, 9^0, 0)-(0, 0^1, 0)$ 谱带中, 记录了线宽随转动量子数变化的情况。观察到这种变化系通过科里奥利相互作用和 $(0, 9^0, 0)\Sigma(K'=0)$ 能级与邻近较高的强预离解 $\Pi(K'=1)$ 及 $\Delta(K'=2)$ 各级的 K -型共振进行解释。

9. 光声光谱

光声光谱技术的高灵敏度, 容许我们对由于谐波、组合谱带和热谱带等所造成的弱吸收作精确的研究。German 等曾用色心激光器、光声吸收池及红外波长计所构成的光声分光计, 测量了跃迁到 HCN 的 ν_3 谱带最低的 25 个转动能级的基频跃迁频率。与计算值相比, 其均方根偏差为 0.002 cm^{-1} 。

哈佛大学在 $14,000\sim 18,500 \text{ cm}^{-1}$ 区内获得了分辨率受多普勒增宽限制的 HCN 、 C_2H_2 和它们的同位素取代分子的 C—H 谐波的光声光谱。求得了光谱常数。在上述光谱区, 他们还取得了一些小的多原子氢化物分子 HN_3 、 HNCO 和氘代甲烷的高分辨率光谱。 HN_3 的 $\nu=5$ 和 $\nu=6$ 的 C—H 伸长谐波产生受多普勒增宽限制的分立光谱, 即使这些态已十分接近离解极限。

哈佛大学的学者并指出, 光声法可用来探测及鉴定短寿命居间产物。他们通过时间分辨限于 25 ns 的激光脉宽, 取得了明确的动力学数据。光声探测的灵敏度, 容许我们对传统方法不能实现的稀溶液和弱吸收居间产物的研究成为可能。通常强荧光分子难于在简单的瞬时吸收中观察, 用本法便不难看到。对毫微秒和亚毫微秒激光脉冲的鉴定, 也提供了一个便利的方法。

美国 Earlham 学院用光声相移法测量了分子的振动/转动弛豫率。

10. 激光感生荧光

美国 Notre Dame 大学用分辨率为 0.05 cm^{-1} 的光谱仪在色散后记录经氦离子激光线激发 NO_2 后所产生的荧光。这样观察到的荧光波长容许我们对位于高振动态的 NO_2 的振动和转动常数作精确的测定。即使在高的分辨率, 早期作者所报道的“连续区”荧光, 没有可证认的结构。

麻省理工学院研究臭氧的离解态和预离解态的激光感生荧光。他们使用位于 266 nm 的 Nd:YAG 激光的四次谐波激发臭氧的 Hartley 连续区, 首先观察到弥散荧光, 清晰地说明了臭氧的振动结构。他们用 Nd:YAG 激光抽运可调谐染料激光, 还取得了一些关于 Huggins 谱带的激发光谱, 并对前所未报道的、具有振动结构的臭氧基态进行讨论, 指出使用这种技术可取得离解态的信息。

11. 受激喇曼光谱

美国 Sandia 国家实验室用 50 K 的脉冲自由喷注, 在室温下记录了 O_2 的基频振动谱带的高分辨率 (0.002 cm^{-1}) 受激喇曼光谱。这些谱带包括正常的 Q -支和位在 1554 及 1558 cm^{-1} 的自旋-自旋和自旋-转动相互作用所导致的分子氧的 $^3\Sigma_g$ 基态的分裂所产生的两个伴 Q -支。这两个伴 Q -支系首次完全加以分辨。关于 $\Delta N_{\Delta J(J, N)} = Q_{0(2,1)}$ 及 $Q_{R(1,1)}$ 线以及关于

$Q_{S(0,1)}$ 及 $Q_{P(2,1)}$ 线测量所得的强度比、与介于 Hund 情况 (a) 和 (b) 之间的耦合情况可相比拟。根据对于一系未分辨开的 $Q_{0 \rightarrow x}$ 三重线所量得的去偏振, 得出基频谱带的去偏振比值为 0.164 ± 0.004 。

12. 微波波谱

日本富山大学和美国国家标准局对胼 ($\text{NH}_2 \cdot \text{NH}_2$) 的微波波谱作了分析。在胼的基振动态中, 有 444 个 $J \leq 31$ 及 $K_a \leq 6$ 的转动跃迁从 7~130 GHz 的范围内作微波测量。把测量到的数据和一个含有 9 个不对称转子常数、14 个 NH_2 反演参数和一个内转动常数的有效哈密顿函数相拟合时, 其全部标准偏差为 0.40 MHz。用一致的群论体系标记能级, 并选择转动哈密顿函数中的许多项, 哈密顿矩阵为 16×16 维的。

美国 Duke 大学用毫米波波谱技术研究在 $^{13}\text{CH}_3\text{F}$ 光抽运红外激光器中的能量转移和碰撞过程。对 HCN 远红外气体放电激光器作特征性的探索, 测量振动态的寿命, 观察不同振动模之间的激光振荡感生竞争效应, 对激发机构的测定和 HCN 激光器为何具有显著效率的基本原理, 提供了探索的途径。

13. 理论分析

美国麻省大学的学者认为, 以往传统的振-转哈密顿函数仅对充分小的原子位移适用。他们以显函数形式取得了对任何原子位移适用的、正确的振-转哈密顿函数。新函数对于大的转动或振动量子数计算光谱时特别重要, 尤其是当分子接近其离解极限时。

加拿大滑铁卢大学用改进的计算方法对双原子分子的离心畸变常数进行计算。他们把 Albritton 等的微扰法重新表述后得出比原法省时很多的正确解。在对 I_2 分子 B 态离心常数的计算, 直到 $v=79$ 的振动能级。计算结果与实验值很相符合。

有关现代分子光谱的研究工作, 还有基体光谱、电子自旋共振光谱、光裂光谱、红外-微波双光子光谱、分子束电共振、声子感生振动能量转移和光学能级交叉等。限于篇幅, 兹不赘述。

四、结 语

近年来, 在新的实验结果所取得的正确数据的基础上, 发展了更为正确的有关分子光谱的理论。关于转动双原子分子的理论, 包括转动及超精细结构能量和处在不同分子态的塞曼及斯塔克效应等, 都有了显著的成就。真空紫外和自由基研究新技术的改进, 使多原子分子的电子光谱和电子结构的探索, 有了迅速的发展。此外, 不仅在远红外和喇曼光谱学方面都有新的发展, 使用定量光谱学、激光器件和相干光学过程, 探索辐射与分子之间的相互作用, 正展开了一个向分子动力学进军的新领域, 使这门学科深入微观领域, 从而丰富了我们熟知的量子物理学、量子化学和分子光谱学本身的内容。

分子动力学的主题是讨论基本的物理和化学反应速率过程中有关分子机构的问题。它涉及分子内的问题和分子间的碰撞, 两者一起构成了所有整体速率现象的微观基础。理解一个系统处在分子能级的动态特性, 是解释整个体系宏观动力学的关键。

自从气体动力学建立以来, 人们一致认为分子间的碰撞, 构成有关气体和液体所有观察到的速率现象的微观机构。直到最近, 实验技术和基础理论的进展, 已能使我们直接从微观的分子能级探索速率过程。当物理和化学反应率本质上的细节可从实验中观察, 并从理论

上加以理解时,我们就开始取得了关于一个分子的有利论点。从此我们就可以观察到物理和化学变化本身的真正过程,也就是反应系统的物理和化学的动力学。

凭借它本身发展的情况,分子动力学现已成为科学领域里的一个分支。高分辨率激光光谱学的成长,使光谱学家已能在小型射频四极场内陷获 10~20 个离子^[4]、通过共振荧光加以探测。一如前述,对于单个定域离子的冷却和陷获及进行光谱研究,已有报道。这就使原子和分子物理学家得以简化对实验数据的注释,例如,在量子统计学以及有关与电磁场总体相互作用等方面。它对分子动态的研究,开辟了新的道路。

在化学方面,这方面的研究工作的发展比较迅速。化学动力学已成为分子动力学的主要分支。它不仅作为宏观动力学的基础,而且对基础化学作用中所涉及的基本现象,已形成新知识的丰富源泉。物理学方面,在我国已引起光学和光谱学家的重视。进一步的探讨,有待于我们的努力。

参 考 文 献

- [1] 郑一善, 红外物理与技术, **10**(1981), 6:53.
- [2] *Program of the 37th Symposium on Molecular Spectroscopy*, The Ohio State University, Columbus, Ohio, June 14~18, 1982.
- [3] McKellar A. R. W. et al., (ed), *Laser Spectroscopy V*, Berlin: Springer, 1981, 7, 353, 359, 360.
- [4] Walter, H. and Rothe K. W. (ed), *Laser Spectroscopy IV*, Berlin: Springer, 1979, 73.

THE PROGRESS OF MODERN MOLECULAR SPECTROSCOPY

ZHENG YISHAN

(*Department of Physics, East China Normal University*)

ABSTRACT

With the advent of rapid-scanning Fourier transform spectrometer, routine molecular spectroscopy is further developed. Mankind had lasers in 1960 and developed since then spectroscopy without spectrometers, as routine tools for the characterization and study of dynamic molecular processes. The experimental techniques and theoretical investigations are continuously growing day after day, so that the topics for research in the molecular spectroscopy are changing. In this paper, the new techniques and the research work the modern spectroscopists engaged in are reviewed.