

构造SO<sub>2</sub>分子势能面的李代数方法

郑雨军,丁世良

山东大学理论化学研究室.济南(250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 把李代数方法得到的SO<sub>2</sub>分子的代数Hamiltonian,利用相干态基经典化并找到一个新的变换,将分子的键角引入,而得到SO<sub>2</sub>分子的势能面。由该势能面计算的解离能,所给出的势能面的立体图和相应的等高线以及力常数与其他方法给出的相一致。该方法可以推广到多原子分子及反应体系。

关键词 [二氧化硫](#) [势能面](#) [李代数](#) [振动态](#) [激发态](#)

分类号 [0641](#)

## Constructing potential energy surface of SO<sub>2</sub> using lie algebra

Zheng Yujun, Ding Shiliang

Shandong Univ, Theoret Chem Lab, Jinan(250100)

**Abstract** Algebraic Hamiltonian of SO<sub>2</sub> molecule is classified using coherent state. The potential energy surface is derived from classical Hamiltonian. We proposed a new transformation for introducing the bond angle to the potential energy surface. We calculated the force constants and dissociation energy using this potential energy surface, and create the surface figure and its contour. These results are in good agreement with previous results. This method can be easily extended to polyatomic molecules.

**Key words** [SULFUR DIOXIDE](#) [POTENTIAL ENERGY SURFACES](#) [LIE ALGEBRA](#) [VIBRATIONAL STATE](#) [EXCITED STATE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“二氧化硫”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [郑雨军](#)

· [丁世良](#)