

物理学

T₂分子X¹Σ⁺g, B¹Σ⁺u和C¹Πu态的势能函数

张霁云, 周玲玲, 谢安东

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

使用SAC/SAC-CI和D95++**, 6-311++g**及cc-PVTZ基组, 分别对T₂分子的基态X¹Σ⁺g、第2激发态B¹Σ⁺u和第3简并激发态C¹Πu的平衡结构和谐振频率进行优化计算. 对所有计算结果进行比较, 得出cc-PVTZ基组为最优基组. 运用cc-PVTZ基组和SAC方法对基态X¹Σ⁺g, SAC-CI方法对激发态B¹Σ⁺u和C¹Πu进行单点能扫描计算, 并用正规方程组拟合Murrell-Sorbie函数, 得到相应电子态的势能函数解析式, 由得到的势能函数计算了与X¹Σ⁺g, B¹Σ⁺u和C¹Πu态相对应的光谱常数, 结果与实验数据吻合.

关键词 [分子结构与势能函数; 激发态; Murrell-Sorbie函数](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 张霁云; 周玲玲; 谢安东

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(438KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献 \[PDF\]](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子结构与势能函数; 激发态; Murrell-Sorbie函数”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [张霁云](#)
- [周玲玲](#)
- [谢安东](#)