

## $NX(a^1\Delta)$ , X=F、Cl、Br)分子结构与 $\omega_e \sim R_e$ 关联模型

刘幼成; 蒋刚; 朱正和

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065

### 摘要:

基于不少双原子分子的稳定激发态系列中存在已知 $\omega_e$ 而未给出 $R_e$ 的现象, 本文提出了 $\omega_e \sim R_e a = C$ 的理论模型, 对近60个双原子分子的光谱数据进行了论证, 并与量子力学计算结果进行了比较. 结果表明, 该模型具有通用性与可靠性. 结合 $NX(a^1\Delta)$ 替代 $O_2(a^1\Delta_g)$ 的新激光系统可能性研究需要, 应用CIS、B3LYP与MCSCF方法, 在6-311+g(3df)基水平计算了 $NX(X=F、Cl、Br)$ 第一激发态( $a^1\Delta$ )的结构, 导出了解析势能函数.

关键词:  $NX(X=F、Cl、Br)$ 分子( $a^1\Delta$ ) 势能函数  $\omega_e \sim R_e$ 关联模型

收稿日期 2003-02-10 修回日期 2003-06-06 网络版发布日期 2003-09-15

通讯作者: 蒋刚 Email: gjiang@pridns.scu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1355KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶  $NX(X=F、Cl、Br)$ 分子( $a^1\Delta$ )

▶ 势能函数

▶  $\omega_e \sim R_e$ 关联模型

本文作者相关文章

▶ 刘幼成

▶ 蒋刚

▶ 朱正和