



### HF分子基态( $X^1\Sigma^+$ )的分子结构与势能函数

庞礼军<sup>1,2</sup>, 汪荣凯<sup>1,3</sup>, 令狐荣锋<sup>1</sup>, 陈世国<sup>1</sup>, 杨向东<sup>3</sup>

1. 贵州师范大学, 理学院, 贵州, 贵阳, 550001;
2. 武汉大学, 国际软件学院, 湖北, 武汉, 430072;
3. 四川大学, 原子与分子物理研究所, 四川, 成都, 610065

### Structure and potential energy function of the groundstate( $X^1\Sigma^+$ ) of HF

PANG Li-jun<sup>1,2</sup>, WANG Rong-kai<sup>1,3</sup>, LINGHU Rong-feng<sup>1</sup>, CHEN Shi-guo<sup>1</sup>, YANG Xiang-dong<sup>3</sup>

1. School of Physics and Chemistry, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China;
2. International School of Software, Wuhan University, Wuhan 430072, China;
3. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (854 KB) HTML (KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

摘要 利用Gaussian程序中电子相关耦合簇方法CCSD(T)和QCISD(T),分别与基组6-311++G\*\*和cc-pvdz组合,优化计算了HF分子基态的平衡结构、离解能.采用标准Murrell—Sorbie函数,进行非线性最小二乘法拟合,得到了HF分子势能函数的解析表达式,并进一步计算出了HF分子的力常数以及光谱常数.计算结果与实验数据非常吻合.

关键词: HF分子 基态 分子结构 势能函数

Abstract: The equilibrium structure and dissociation energy of HF molecule at the ground state are calculated and optimized using quantum chemistry methods CCSD(T)and QCISD(T)at the 6-311++G\*\* and cc-pvdz basis set.The analytic potential energy function of HF at the ground state is derived by least square fitting to the Murrell-Sorbie function,and the force constants and the optical constants are calculated.The calculating results are in good agreement with the experiment data.

Key words: HF molecule ground state molecule structure potential energy function

收稿日期: 2006-06-20;

基金资助:国家自然科学基金资助项目(10574096);贵州省教育厅自然科学重点资助项目(2005105);中国物理教育学会基金资助项目(35120)

引用本文:

庞礼军,汪荣凯,令狐荣锋等. HF分子基态( $X^1\Sigma^+$ )的分子结构与势能函数[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2007, 29(2): 156-159.

PANG Li-jun,WANG Rong-kai,LINGHU Rong-feng et al. Structure and potential energy function of the groundstate( $X^1\Sigma^+$ ) of HF[J]. , 2007, 29(2): 156-159.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

#### 服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

#### 作者相关文章

- ▶ 庞礼军
- ▶ 汪荣凯
- ▶ 令狐荣锋
- ▶ 陈世国
- ▶ 杨向东

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版：云南大学学报编辑部（昆明市翠湖北路2号，650091）

电话：0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com