

UHⁿ⁺ (n=1,2,3) 分子离子的势能函数和稳定性

王红艳, 李权, 朱正和

四川大学原子分子物理研究所 四川成都

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

用密度泛函B3LYP方法研究了UH⁺, UH₂⁺ 和UH₃⁺ 分子离子的势能函数. UH⁺ 具有稳定极小点, UH₂⁺ 是具有极大和极小的“能量阱”分子离子, UH₃⁺ 不能稳定存在. 同时由势能函数导出了UH⁺ 和UH₂⁺ 的力学性质和光谱数据.

The theoretical study on UHⁿ⁺ (n=1, 2, 3) ions using density functional method shows that UH⁺ ($\times 5 \Sigma$) is stable, and UH₃⁺ ($\times 5 \Sigma$) ion is unstable. While the potential energy curve of UH₂⁺ ($\times 4 \Sigma$) has both minimum and maximum, which is so-called the "energy trapped" molecules. This sort of potential maximum is chiefly due to Coulomb repulsion. The perturbation effect of ionic charges has been proposed to explain why the maximum can exist for diatomic...

关键词 [分子离子](#) [势能函数](#) [密度泛函](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 王红艳; 李权; 朱正和

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(718KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [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“分子离子”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
 - [王红艳](#)
 - [李权](#)
 - [朱正和](#)