

交叉学科

基于核运动效应下的H同位素双原子分子的解析势能函

王蓉, 张莉, 蒋刚, 朱正和[#]

四川大学原子与分子物理研究所, 四川 成都 610065

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

在加入核运动效应修正下的Born-Oppenheimer近似电子能量的基础上, 采用 QCISD(T)/ aug-cc-pvqz方法计算出H同位素双原子分子(H₂, HD, HT, D₂, DT, T₂)的势能函数参数, 获得体现H同位素分子质量差异下的势能函数。并在此基础上导出H同位素分子的力常数和光谱数据。同时对于OH, OD和OT分子采用QCISD/aug-cc-pvtz方法计算, 同样获得了这些分子对应的势能函数、力常数和光谱数据。

Based on the correction of the electron energy under Born-Oppenheimer approximation using nuclear motion effect, the parameters of potential energy functions for hydrogen isotopic diatomic molecules (H₂, HD, HT, D₂, DT, T₂) are calculated with QCISD (T) method and aug-cc-pvqz basis set, and those potential energy functions that indicate the differences from the masses of hydrogen isotopic atoms are obtained. The force constants and spectroscopic data of those molecules are calculated as well. The potential energy functions, force constants, and spectroscopic data of the isotopic diatomic molecules OH, OD, and OT are also derived using QCISD method and aug-cc-pvtz basis set.

关键词 [H同位素分子](#); [Murrell Sorbie函数](#); [核运动](#); [同位素效应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

朱正和 zhuxm@scu.edu.cn

作者个人主页: 王蓉; 张莉; 蒋刚; 朱正和[#]

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(781KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“H同位素分子; Murrell Sorbie函数; 核运动; 同位素效应”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王蓉](#)

· [张莉](#)

· [蒋刚](#)

· [朱正和](#)