

研究论文

HXeBr分子的振动频率和离解途径的理论研究

朱华¹, 谢代前²

1. 四川大学化学学院, 成都 610064;
2. 南京大学化学化工学院, 理论与计算化学研究所介观化学实验室, 南京 210093

收稿日期 2006-12-1 修回日期 网络版发布日期 2008-1-17 接受日期

摘要 采用MP2和CCSD(T)方法对HXeBr分子的振动光谱进行了理论研究. 计算结果表明, 经非谐性和基质效应修正后的H—Xe伸缩振动、弯曲振动以及Xe—Br伸缩振动频率分别为1492, 509和174 cm^{-1} , 与实验结果吻合得较好. 此外分别采用单参考组态的CCSD(T)方法和多参考组态耦合簇(MR-AQCC)方法研究了HXeBr分子的稳定性和离解途径. 研究表明, 离解途径HXeBr \rightarrow Xe+HBr和HXeBr \rightarrow H+Xe+Br的能垒分别为1.39和0.89 eV, 三体离解途径是HXeBr分子的主要离解途径.

关键词 [HXeBr分子](#) [振动频率](#) [离解途径](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

朱华 zhuhua.zhu@163.com

作者个人主页: 朱华¹; 谢代前²

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDE\(175KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“HXeBr分子”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- [朱华, 谢代前](#)