

研究论文

PuC和PuC₂的分子结构与势能函数

李赣; 孙颖; 汪小琳; 高涛; 朱正和

中国工程物理研究院, 绵阳919信箱71分箱 621900; 四川大学原子与分子工程研究所, 成都 610065

摘要:

采用密度泛函B3LYP方法和相对论有效原子实理论模型优化出PuC和PuC₂分子稳定构型, 其电子状态分别为X⁵Σ⁻和X⁵A₂. PuC₂分子为C_{2v}构型, 其∠CPuC=147.67°, 平衡核间距Re=0.22819 nm, 离解能De=5.543 eV, 并计算出谐振动频率: ν₁=61.736 cm⁻¹、ν₂=229.894 cm⁻¹、ν₃=305.582 cm⁻¹. 在此基础上, 运用多体项展式理论方法, 导出了基态PuC₂分子的分析势能函数, 该势能面准确地再现了PuC₂分子的稳定结构, 并根据势能面等值图讨论了PuC+C反应和Pu+C₂反应的势能面静态特征.

关键词: PuC PuC₂ 相对论有效原子实势 多体展式势能函数

收稿日期 2002-08-19 修回日期 2002-12-03 网络版发布日期 2003-04-15

通讯作者: 李赣 Email: 2002ligan@sina.com

本刊中的类似文章

1. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. Pu(⁷F_g) + CO(X¹Σ⁺, 0, 0)的分子反应动力学 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 302-306

扩展功能

本文信息

[PDF\(1445KB\)](#)

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

- ▶ PuC
- ▶ PuC₂
- ▶ 相对论有效原子实势
- ▶ 多体展式势能函数

本文作者相关文章

- ▶ 李赣
- ▶ 孙颖
- ▶ 汪小琳
- ▶ 高涛
- ▶ 朱正和