

## Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>的几何结构和垂直激发态光谱的量子化学研究

张华北, 田安民, 鄢国森

四川大学化学系|四川成都 610064

摘要:

在ab initio DZP水平下, 用能量梯度法对Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>的几何构型进行了优化, 并用单、双激发组态相互作用(CISD)进行了垂直激发的和振子强度计算. 结果表明: Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>(C<sub>2v</sub>)中存在着三个强度较大的跃迁, 分别是基态跃迁到3<sup>1</sup>B<sub>2</sub>、1<sup>1</sup>B<sub>1</sub>、4<sup>1</sup>A<sub>1</sub>态. Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>(D<sub>2h</sub>)中存在着三个强度较大的跃迁, 分别是基态跃迁到1<sup>1</sup>B<sub>2u</sub>、2<sup>1</sup>B<sub>1u</sub>、3<sup>1</sup>B<sub>2u</sub>态. 这些强度较大的跃迁均为粒子穴跃迁. 在我们能查阅的文献范围内, 本工作是首次性的.

关键词: 异核簇合物 垂直激发态 振子强度

收稿日期 1994-01-27 修回日期 1994-07-18 网络版发布日期 1995-02-15

通讯作者: 田安民 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 张华北;田安民;鄢国森.Li<sub>3</sub>Al和Li<sub>2</sub>B<sub>2</sub>的稳定性和垂直激发态光谱[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 481-483
2. 任彦亮;万坚;刘俊军;万洪文.吡吩垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1089-1092
3. 李国胜;郑能武;苏伟;张毅;潘龙.锂原子高里德伯态跃迁的振子强度和辐射寿命[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 879-884

扩展功能

本文信息

PDF(680KB)

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

▶ 异核簇合物

▶ 垂直激发态

▶ 振子强度

本文作者相关文章

▶ 张华北

▶ 田安民

▶ 鄢国森