

结构材料及核材料性能

## 同位素分子势能函数的核运动及同位素效应

罗文浪<sup>1,2</sup>, 阮文<sup>1,2</sup>, 张莉<sup>1</sup>, 朱正和

1.四川大学 原子分子物理研究所, 四川 成都 610065 2.井冈山大学 信息科学学院, 江西.吉安 343009

收稿日期 2007-11-15 修回日期 2007-12-3 网络版发布日期: 2008-1-20

**摘要** 一般的分子势能函数均未考虑核运动效应, 仅是Born-Oppenheimer近似下电子的本征能量函数, 因此, 具有相同电子数和不同质量数的同位素分子势能函数不可区分。基于核运动效应, 用核的振动、转动和平动能修正Born-Oppenheimer近似下的电子能量, 可求得同位素分子的离解能和力常数, 并以此确定三体项的参数。利用同位素效应, 可推导同位素两体项势能函数的各参数, 由此可获得同位素分子的多体项展式解析势能函数。以HTO为例, 用核运动效应和同位素效应获得了其多体项展式解析势能函数, 其等值势能图正确反映了的平衡构型和离解能、H和T的同位素效应, 以及  $H+OT \rightarrow HTO$  和  $T+OH \rightarrow HTO$  的反应特征。

**关键词** [核运动效应](#); [同位素效应](#); [同位素分子势能函数](#)

分类号 [0561.2](#)

## Nuclear Motion and Isotopic Effect in Potential Energy Functions of Isotopic Molecules

LUO Wenlang<sup>1,2</sup>, RUAN Wen<sup>1,2</sup>, ZHANG Li<sup>1</sup>, ZHU Zhenghe<sup>1</sup>

1. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China;  
2. College of Information Science, Jinggangshan University, Ji'an 343009, China

**Abstract** 1. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China;  
2. College of Information Science, Jinggangshan University, Ji'an 343009, China

**Key words** [nuclear motion effect](#) [isotopic effect](#) [potential energy function](#)

DOI

通讯作者

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [\[PDF全文\]\(1238KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

#### 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ [本刊中 包含“核运动效应; 同位素效应; 同位素分子势能函数”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [罗文浪](#)
- [阮文](#)
- [张莉](#)