

研究论文

HO₂自由基电子激发态的理论研究

李步通¹, 魏子章¹, 潘清江², 张红星¹, 孙家锺¹

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023;
2. 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨150080

收稿日期 2005-12-31 修回日期 网络版发布日期 2006-11-7 接受日期

摘要 采用CASPT2/CASSCF方法对HO₂自由基进行统计算, 优化了三个电子态的稳定点几何构型, 得到详细的频率数据. 利用垂直激发计算确定了3个里德堡态、11个价电子态的电子结构以及在三种理论水平上(CASSCF, SS-CASPT2和MS-CASPT2)的能量信息. 计算中使用了ANO-L和ANO-L⁺基组, 验证了已知实验数据的同时, 通过与其它理论计算结果的对比, 揭示了应用弥散轨道系数对于该体系激发态研究的重要性.

关键词 [电子激发态](#) [CASPT2](#) [里德堡态](#) [HO₂自由基](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

张红星 zhanghx@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页: 李步通¹; 魏子章¹; 潘清江²; 张红星¹; 孙家锺¹

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(234KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“电子激发态”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [李步通, 魏子章, 潘清江, 张红星, 孙家锺](#)