

## 离子簇合物 $N_2^+He_n$ ( $n=1, 2, 3$ )的*ab initio*研究

唐思清, 李慎敏, 杨忠志

吉林大学理论化学研究所和理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

利用Gaussian 92量子化学从头算程序, 选择UMP2 / 6-311G\*方法, 对 $N_2+He$ ,  $N_2+He_2$ 和 $N_2+He_3$ 等离子簇合物进行了几何优化, 并通过频率分析确认了体系的稳定构型. 在此基础上, 采用UQCISD / 6-311G\*\* / UMP2 / 6-311G\*方法, 得到了各体系的离解能, 用UHF / 6-311G\*方法, 计算了 $N_2^+$ 离子在 $n$ 个氦原子 ( $n=1, 2, 3$ ) 氛围中的转动势垒. 由三个体系的转动势垒得知,  $N_2^+$ 离子可以在 $n$ 氦原子 ( $n=1, 2, 3$ ) 中自由转动. 利用UCIS / 6-311G\*方法计算了 $N_2+He$ 的 $B \leftarrow X$ 跃迁的电子激发能. 这些计算可以阐明Maier等的实验结果.

关键词: 离子簇合物 稳定构型 转动势垒 离解能

收稿日期 1994-12-06 修回日期 1995-02-06 网络版发布日期 1995-09-15

通讯作者: 杨忠志 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 李巍; 屈军艳; 赵新生.  $[He_3H]^+$ 分子基态势能面的从头计算研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 751-756
2. 苏克和; 文振翼; 胡小玲; 李秀仪; 王育彬.  $NH^{0-1+}_{2-3}$  离解能等的高级*ab initio*计算与评价[J]. 物理化学学报, 1996, 12(05): 385-390
3. 渠双双; 孙卫国; 王宇杰; 樊群超. 卤素双原子分子部分电子态的完全振动能谱和离解能[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 13-18
4. 苏克和, Deakyn C A, Liebman J F. 某些离解能、电子亲合能等的G2计算与评价[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 865-869

扩展功能

本文信息

PDF(1074KB)

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

▶ 离子簇合物

▶ 稳定构型

▶ 转动势垒

▶ 离解能

本文作者相关文章

▶ 唐思清

▶ 李慎敏

▶ 杨忠志