# <sup>6,7</sup>LiD 的分子势能函数、力常数和光谱常数

李如松<sup>1,2</sup>,方国明<sup>2</sup>,宋启星<sup>2</sup>,刘文杰<sup>2</sup>,何 彬<sup>1</sup>, 姬国勋<sup>1</sup>,许 鹏<sup>1</sup>,牛莉博<sup>1</sup>

1. 第二炮兵工程大学,陕西西安 710025;
 2. 中国人民解放军 96373 部队,青海西宁 810011

**摘要:**为了提供<sup>6,7</sup>LiD 与 H<sub>2</sub>O 之间潮解机制研究所需的解析势能函数,采用 B3LYP/6-311G(2df,pd)方法 对<sup>6</sup>LiD、<sup>7</sup>LiD 分子进行了几何结构优化,并在相同理论水平上进行单点能扫描计算,通过用核运动效应修正 Born-Oppenheimer(B-O)近似下的电子能量。利用 Murrell-Sorbie 势能函数,得到了体现同位素原子质量差 异的同位素双原子分子势能函数,并计算得到了力常数和光谱数据,其值与实验数据基本一致。 关键词:分子结构;势能函数;电子状态;反应静力学 中图分类号:O641.12 文献标志码:A 文章编号:0253-9950(2016)01-0013-06 doi:10.7538/hhx,2016.38.01.0013

# Potential Functions, Force Constants and Spectrum Constants for <sup>6,7</sup>LiD Molecules

LI Ru-song<sup>1,2</sup>, FANG Guo-ming<sup>2</sup>, SONG Qi-xing<sup>2</sup>, LIU Wen-jie<sup>2</sup>, HE Bin<sup>1</sup>, JI Guo-xun<sup>1</sup>, XU Peng<sup>1</sup>, NIU Li-bo<sup>1</sup>

The Second Artillery Engineering University, Xi'an 710025, China;
 Army 96373 of the Chinese People's Liberation Army, Xining 810011, China

Abstract: To provide analytical potential functions for possible mechanisms for  $^{6,7}$ LiD reactions with H<sub>2</sub>O, geometrical optimization of <sup>6</sup>LiD and <sup>7</sup>LiD molecules with B3LYP/6-311G (2df, pd) method was adopted. Then single-point energies at the same level were scanned, and electronic energies using nuclear motion effect corrected Born-Oppenheimer approximation were obtained. Diatomic molecule potentials manifestation of isotopic atomic mass difference was acquired using Murrell-Sorbie function. Force constants and spectrum constants by calculation are consistent basically with available experimental data.

Key words: molecular structure; potential function; electronic state; reaction statics

<sup>6</sup>LiD化学性质非常活泼,可与空气中的水蒸 气发生反应,在水中这种反应更为剧烈。粉末状 的<sup>°</sup>LiD在潮湿的空气中可以自燃,有时甚至发 生粉尘爆炸。此外还易与其它有机溶剂反应,如

收稿日期:2015-10-10;修订日期:2015-12-05

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51401237,51271198,11474358);第二炮兵工程大学基金项目(2014QNJJ018, YX2012cxpy06)

作者简介:李如松(1983一),男,安徽五河人,博士,讲师,从事核材料科学计算研究

乙醇、乙醚等。这些材料极易与水反应,会使产品 潮解、变质,品位下降,并且反应生成的氢(氘、氚) 氧化锂是一种强碱,具有很强的腐蚀作用。为了 保证质量,产品表面均涂有保护层。保护层轻微 脱落者,必须按规定的工艺进行修补。为了防止 材料的潮解,在LiH/LiD部件的表面涂上一层薄 的防潮物质,但这只能使潮解减弱,原因是防潮物 质的透湿系数不为零,从而导致在长期贮存过程 中该材料潮解和品位降低。

中国工程物理研究院正在从实验方面研究氢 化锂保护膜的老化规律与机制,认为在潮湿的空 气中,最初和湿气反应生成 LiOH 层,然后 LiOH 再和其它的氢化锂缓慢反应得到 Li<sub>2</sub>O 和 H<sub>2</sub>,最 后在 LiH 表面会形成 LiOH 或 Li<sub>2</sub>O 层。而在相 对湿度大于 15% 空气中暴露时,倾向于生成 LiOH • H<sub>2</sub>O<sup>[1-2]</sup>。李赣等<sup>[3]</sup>进而研究了氘化锂粉 末与 O2、CO2 和水汽的反应动力学,结果表明,氘 化锂与O<sub>2</sub>、CO<sub>2</sub>的反应很微弱,而与水汽的反应 速率相对要大的多。Dinh 和 Plummer 等<sup>[4-6]</sup>采 用程序升温方法研究了 LiOH 的分解过程以及水 汽存在下 LiH 的腐蚀速率,分析了 LiH 的氧化腐 蚀机理。徐梅等[7]分别运用二次组态相互作用 QCISD(T)/6-311++G(3df,2pd)方法和电子相 关单双耦合簇 CCSD(T)/6-311++G\*\* 研究了 氢化锂(LiH)分子基态的结构与势能函数。 罗德礼等<sup>[1]</sup>基于相对论有效原子实势(RECP)和 密度泛函(B3LYP/SDD)方法,优化得到了 LiH 的 Murrell-Sorbie 分析势能函数。谢安东等<sup>[8]</sup>利 用 SAC/SAC-CI 方法,使用 D95(d)、6-311G\*\* 及 cc-PVTZ 等基组,对 LiH 分子的基态( $X^{1}\Sigma^{+}$ )、第  $- 激发态(A<sup>1</sup>\Sigma<sup>+</sup>)及第二简并激发态(B<sup>1</sup>\Pi)的平$ 衡结构和谐振频率进行了优化计算,利用 SAC 的 GSUM(group sum of operators)方法对基态  $(X^{1}\Sigma^{+})$ 、SAC-CI的GSUM方法对激发态 $(A^{1}\Sigma^{+})$ 和 B<sup>1</sup> Π)进行单点能扫描计算,用正规方程组拟合 函数,得到了相应电子态的完整势能函数,所得结 果均与实验符合较好。雷洁红等<sup>[9-10]</sup>研究了 LiX (X=H、D、T)与水的反应,计算了反应体系最低 势能面上各驻点的构型参数、振动频率和能量,并 计算了反应的速率常数。同时采用密度泛函理论 方法研究了高温高压条件下 LiD 的热力学性质 与温度和压强之间的关系[11-12]。

然而,目前几乎没有从微观角度揭示<sup>6.7</sup> LiD 与 H<sub>2</sub>O 之间的潮解机制。因此,本工作拟利用量

子化学方法计算<sup>6.7</sup> LiD 分子的势能函数、力常数 和光谱常数,为下一步<sup>6.7</sup> LiD 与 H<sub>2</sub>O 之间反应的 反应通道、势能曲面和 H 同位素效应研究提供重 要的理论依据。

## 1 计算方法

在 Born-Oppenheimer(B-O)近似下由于忽略 了核的运动效应,使得<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子与<sup>7</sup>LiH 分子势能函数、力常数、离解能等具有不可区分 性<sup>[13-15]</sup>。本工作提出一种电子能量修正方法,通 过计算<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子与<sup>7</sup>LiH 分子不同的核运 动能量,修正在 B-O 近似下计算得到的电子能 量,以获得体现氢、锂同位素质量差异的各分子基 态的势能值,同时,通过优化计算确定<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态的稳定构型和平衡几何参数,确 定其正确的离解极限。

采用 Gaussian09 软件,使用二次组态相互作 用(quadratic configuration interaction, QCISD) 和密度泛函 B3LYP 方法,分别结合 6-311G(df, pd)、6-311G(df,2pd)、6-311G(2df,pd)和 6-311G (2df,2pd)基组对<sup>7</sup>LiD 分子基态进行了几何优 化,并通过理论计算,优选出最佳的方法与基组组 合为 B3LYP/6-311G(2df,pd)。使用该法与基组 组合分别对<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态进行了几何优 化及势能扫描计算,经过核动能修正,得到相应的 势能值,然后用非线性最小二乘法拟合出 Murrell-Sorbie 函数的参数,并由此计算出各阶力常数和 光谱常数。

### 2 结果和讨论

#### 2.1 °LiD 和'LiD 分子基态的结构参数

采用 QCISD 和 B3LYP 方法,分别结合 6-311G(df,pd)、6-311G(df,2pd)、6-311G(2df,pd) 和 6-311G(2df,2pd)基组,对<sup>7</sup>LiD 分子基态进行 结构优化计算,由优化结果可知 B3LYP/6-311G (2df,pd)为最佳方法与基组组合。利用优选出的 方法与基组分别对<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态(X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>) 进行优化计算,结构优化结果列入表 1,其相应的 电子能量和核运动能列入表 2。

同位素分子离解能(D<sub>e</sub>)的计算如公式(1)<sup>[16-18]</sup>。

 $D_{e} = xE_{e}(\mathbf{M}) + yE_{e}(\mathbf{N}) - E_{e}(\mathbf{M}_{x}\mathbf{N}_{y}) +$ 

 $xE_n(M) + yE_n(N) - E_n(M_xN_y)$  (1) 其中: $E_e$ ,电子能量; $E_n$ ,核运动能量;x、y,分子中 M 原子和 N 原子的个数。 表 1 <sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态( $X^1\Sigma^+$ )结构优化结果

Table 1  $\,$  Structural optimization results of  $^6\,LiD$  and  $^7\,LiD$  ground state (  $X^1\,\Sigma^+$  )

分子	电子态	$r/\mathrm{nm}$	$D_{ m e}/{ m eV}$	$\omega_{ m e}/{ m cm}^{-1}$
<sup>6</sup> LiD	$X^1\Sigma^+$	0.159 2	2.407	1 077.32
<sup>7</sup> LiD	$X^1\Sigma^+$	0.159 2	2.410	1 057.87

注:r为Li-D平衡原子间距,we为谐振频率

表 2 <sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子的电子能量和核运动能

Table 2 Electron energies and nuclear motion energies of <sup>6</sup>LiD and <sup>7</sup>LiD molecules

分子	$E_{ m e}(^7{ m Li})/{ m eV}$	$E_{ m e}(^6{ m Li})/{ m eV}$	$E_{e}(H)/$ $E_{e}(D)/$ $E_{e}(T)/$ eV eV eV		$E_{ m e}({ m M})/{ m eV}$	$\frac{E_n(M)}{(K \cdot Cal \cdot mol^{-1})}$		
<sup>6</sup> LiD		-203.876635		-13.666678		-220.012048	3.038	
<sup>7</sup> LiD	-203.883139			-13.666678		-220.013246	3.012	

#### 2.2 "LiD 和7 LiD 的分子势能函数与光谱性质

目前,分子势能函数没有考虑核运动效应,它 仅仅是在 B-O 近似下的电子本征能量函数,此时 近似地把电子运动看作不受核运动的影响,因此 在 B-O 近似下,具有相同电子数和不同核质量的 同位素分子势能函数不可区分。实际上,分子核 运动客观存在,并且会影响电子运动,从而导致其 势能函数与现行 B-O 近似下不同程度的差别。 文献[19-20]提供了同位素分子 H<sub>2</sub> 与 T<sub>2</sub> 以及 OH 与 OD 的实测光谱常数,结果列入表 3。 $\omega_e$  为 谐振频率, $\chi_e$  为非谐振因子, $B_e$  和  $a_e$  分别为刚性 和非刚性转动因子。

表 3 同位素分子  $H_2$ 、 $T_2$ 、OH 和 OD 的实测光谱常数<sup>[19-20]</sup>

分子	$\omega_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$B_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$a_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$\omega_{ m e}\chi_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$r_{ m e}/{ m nm}$
$H_2$	4 401.21	60.853	3.062 2	121.336	0.074 14
$T_2$	2 546.47	20.335	0.588 7	41.230	0.074 14
OH	3 737.76	18.911	0.724 2	84.881	0.096 97
OD	2 720.24	10.021	0.275 7	44.055	0.096 98

Table 3 Experimental spectrum constants for isotopic molecules  $H_2$  ,  $T_2$  , OH and  $\mathrm{OD}^{\text{[19-20]}}$ 

由表 3 可知,尽管同位素分子 H<sub>2</sub> 与 T<sub>2</sub> 以及 OH 与 OD 电子数相同,但由于核的质量不同,其 光谱性质有所不同,且同位素效应很明显,所以 B-O 近似仅为一种有限的近似。现在的问题是如 何修正 B-O 近似下的势能函数,使其进一步接近 实际值以体现同位素分子势能函数的差异。现行 的势能函数又称分子内势能函数,由于内坐标与 核运动密切相关,因而与振动能  $E_v$ 、约化质量  $\mu$ 和力常数 k 等相关。 $E_v$ 、 $\mu$  和 k 与  $\omega$ 、振动量子数  $(v)之间关系如式(2)、(3)^{[20]}$ 。式中:h 为普朗克 常数,c 为光速。

$$E_{v} = \left(v + \frac{1}{2}\right)hc\omega \tag{2}$$

$$\omega = \frac{1}{2\pi\epsilon}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \tag{3}$$

所以,同位素分子的势能函数可以从 E<sub>x</sub>,ω 和 μ 几个 方面考虑进行校正。例如,<sup>7</sup>LiH(D,T)和<sup>6</sup>LiH(D,T) 分子可用核的振动、转动和平动能修正 B-O 近似 下的电子能量,以获得体现氢、氚同位素差异的势 能值,并求得体现核运动效应的力常数。

为描述双原子分子的解析势能函数,到目前 为止已经提出了大量的函数。其中,Murrell-Sorbie势能函数是迄今为止最好的解析势能函数 形式之一,不仅在吸引支和排斥支均比H-H函数 好,而且与 RKR 光谱数据非常相似。Murrell-Sorbie 函数一般形式如式(4)。

$$V(\rho) = -D_{\rm e} \left(1 + \sum_{i}^{n} a_{i} \rho^{i}\right) \exp(-a_{1} \rho) \quad (4)$$

式中: $\rho = r - r_e$ , r和  $r_e$ 分别为核间距和平衡核间 距;  $D_e$ 为离解能;  $a_i$ 为拟合的参数;  $D_e$ 、 $a_i$ 均由拟 合得到。由于多项式的顺序可以影响拟合的结构,所以对不同的分子,n的取值也不同。通过拟合工作,发现截止到9次方项可以得到很好的拟合结果。所以在拟合的过程中 Murrell-Sorbie 函数形式如式(5)。

$$V(\rho) = -D_{e}(1 + a_{1}\rho + a_{2}\rho^{2} + a_{3}\rho^{3} + a_{4}\rho^{4} + a_{5}\rho^{5} + a_{6}\rho^{6} + a_{7}\rho^{7} + a_{8}\rho^{8} + a_{9}\rho^{9})\exp(-a_{1}\rho)$$
(5)

因此,要获得分子的势能函数,首先要确定(5) 式中的9个参数 a<sub>1</sub>—a<sub>9</sub> 和离解能 D<sub>e</sub>。这些量可以 通过一系列单点能的计算,获得不同核间距下的势 能值来拟合得到。为了获得体现同位素差异下的 势能函数,本工作对每一个分子均计算了 80 多个 不同核间距的电子能量和相应的核动能,用核动能 修正电子能量,得到修正后的势能值,即:V=E<sub>n</sub>+ E<sub>e</sub>。最后,用最小二乘法拟合得到势能函数参数, 根据力常数与各个参数之间的关系式(6)-(8)<sup>[21-22]</sup>,计算出各力常数,计算结果列入表 4。

$$f_2 = D_{\rm e}(a_1^2 - 2a_2) \tag{6}$$

$$f_{3} = 6D_{\rm e} \left( a_{1}a_{2} - a_{3} - \frac{a_{1}^{3}}{3} \right) \tag{7}$$

$$f_4 = D_e(3a_1^4 - 12a_1^2a_2 + 24a_1a_3)$$
(8)

表 4 <sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态的 Murrell-Sorbie 势能函数参数与力常数

Table 4 Murrell-Sorbie potential parameters and force constants of 6 LiD and 7 LiD ground states

分子	$a_1/\mathrm{nm}^{-1}$	$a_2/\mathrm{nm}^{-2}$	$a_3/\mathrm{nm}^{-3}$	$10^{16} f_2 / (J \cdot nm^{-2})$	$10^{15} f_3 / (\text{J} \cdot \text{nm}^{-3})$	$10^{14} f_4 / (J \cdot nm^{-4})$
<sup>6</sup> LiD	12.50	-55.45	172.72	105.50	-3595.04	90 488.11
<sup>7</sup> LiD	12.51	-55.37	172.74	106.53	-3595.53	90 484.71

图 1-2 分别给出采用 Murrell-Sorbie 函数 拟合的<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态势能函数, 拟合数据 与理论计算值之间的相关系数为 0.999。



在 B-O 近似下,分子势能函数是电子本征能 量函数,近似地把电子运动看作不受核运动的影 响,因此同一种元素的同位素分子的势能函数均 相同。实际上,核运动肯定要影响电子运动,例 如,H<sub>2</sub> 与 D<sub>2</sub>、DT 以及 OH 与 OD 的实测光谱数 据有所不同,可见同位素效应明显,本工作采用文 献「19,23-24 ] 的方法,即 B3LYP/6-311G (2df, pd)方法计算得到了<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态的平衡间距、离解能及谐振频率,<sup>7</sup>LiD 计算值与实验 值很接近。修正了同位素双原子分子的势能函数,所得光谱数据也与实验值(<sup>6</sup>LiD 分子不存在 可获的实验数据)符合得很好。



根据计算得到的二阶、三阶和四阶力常数, 利用文献[25]的方法及公式(9)、(10)<sup>[7,20]</sup>计算 得到<sup>6</sup>LiD和<sup>7</sup>LiD分子基态的光谱常数(式(11)、 (12)),并给出了相应的实验数据,结果列入 表 5。

表 5 <sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 分子基态的光谱常数 Table 5 Spectrum data of <sup>6</sup>LiD and <sup>7</sup>LiD ground states

分子	$\omega_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$B_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$a_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$\omega_{ m e}\chi_{ m e}/{ m cm}^{-1}$
<sup>6</sup> LiD	1 092.399	4.439 7	0.087 5	15.156
<sup>7</sup> LiD	1 077.923	4.281 2	0.080 7	14.230
	$1 \ 055. \ 12^{1)}$	4.233 8 <sup>1)</sup>	$0.091 \ 98^{1}$	13. 2281)

注:1) 实验值

$$B_{\rm e} = \frac{h}{8\pi^2 \mu c r_{\rm e}^2} \tag{9}$$

$$a_{\rm e} = -\frac{6B_{\rm e}^2}{\omega_{\rm e}} \left(\frac{f_3 r_{\rm e}}{3f_2} + 1\right) \tag{10}$$

$$\omega_{\rm e}\chi_{\rm e} = \frac{B_{\rm e}}{8} \left( -\frac{f_4 r_{\rm e}^2}{f_2} + 15 \left(1 + \frac{\omega_{\rm e} a_{\rm e}}{6B_{\rm e}^2}\right)^2 \right) \quad (11)$$

$$\omega_{\rm e} = \sqrt{\frac{f_2}{4\pi^2 \mu c^2}} \tag{12}$$

还可以利用双原子分子的同位素效应,根据 已有的<sup>7</sup>LiD分子基态的光谱实验数据,获 得<sup>6</sup>LiD分子基态的光谱数据。如果两个同位素 分子中一个的光谱常数右上角标以*i*,由于同位 素效应,则两个同位素的分子光谱常数间关系 如式(13)-(16)<sup>[19-20]</sup>。

$$\omega_{\rm e}^i = \omega_{\rm e} \sqrt{\frac{\mu}{\mu^i}} \tag{13}$$

$$\omega_{\rm e}^{i}\chi_{\rm e}^{i} = \frac{\mu}{\mu^{i}}\omega_{\rm e}\chi_{\rm e} \tag{14}$$

$$B_{\rm e}^i = \frac{\mu}{\mu^i} B_{\rm e} \tag{15}$$

 $a_{\rm e}^{i} = \left(\frac{\mu}{\mu^{i}}\right)^{3/2} a_{\rm e} \tag{16}$ 

这些关系式可用于同位素分子之间光谱常数的相 互推导,计算结果列入表 6。对比表 5 和表 6 可 知,本工作计算<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD 的各项光谱数据与实 验值和由实验值反演的相关数据符合得很好,这 表明该理论方法可行。

由表 5 还可知,计算结果与实验数据都符合很 好,所以用 B3LYP/6-311G(2df,pd)方法计算 出<sup>6</sup>LiD分子的ω<sub>e</sub>、B<sub>e</sub>、a<sub>e</sub>、ω<sub>e</sub>χ<sub>e</sub>数据比较精确。所 研究的<sup>6</sup>LiD和<sup>7</sup>LiD分子基态的势能函数同位素效 应不如文献[9-10,24]所报道的 H 同位素双原子分 子的明显,其原因可能是,H 同位素之间的质量差 别很大,当考虑核运动效应后,氢同位素分子的势 能函数将有一定的差异,特别是在平衡位置附近更 为明显,而所研究同位素分子之间的质量差别不是 十分明显,故同位素效应小。由图 1—2 可知,经过 修正后的两个分子的势能函数曲线十分接近,因此 小分子同位素效应比大分子的同位素效应要大。

表 6 <sup>7</sup>LiD 光谱实验数据推导的同位素分子光谱常数

Гable б	Spectrum	data of	isotopic	molecules	deduced	from	experimental	spectrum	data	of 7 I	LiD
								- 1			

分子	$\mu/\mu^i$	$\omega_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$B_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$a_{ m e}/{ m cm}^{-1}$	$\omega_{ m e}\chi_{ m e}/{ m cm}^{-1}$
<sup>6</sup> LiD	0.571 4	1 073.582	4.383	0.095 0	13.533
<sup>7</sup> LiD	0.052 6	1 054.237	4.226	0.090 0	13.050

# 3 结 论

采用 B3LYP/6-311G(2df,pd)方法对<sup>6</sup>LiD 和<sup>7</sup>LiD分子进行了几何结构优化,并在相同理论 水平上进行单点能扫描计算,通过用核运动效应 修正 B-O 近似下的电子能量。利用 Murrell-Sorbie势能函数,得到了体现同位素原子质量差 异的同位素双原子分子势能函数,并进一步计算 得到了力常数和光谱数据,其与实验得到的结果 基本一致,可用于进一步研究分子的反应动力学 特征,也为同位素分子的研究提供一定的理论 依据。

#### 参考文献:

- [1] 罗德礼,蒙大桥,朱正和.LiH,LiO和LiOH的分析
   势能函数与分子反应动力学[J].物理学报,2003,52
   (10):2438-2442.
- [2] 朱志艳,朱正和,张莉,等.T+OD体系的同位素交 换反应动力学[J].物理学报,2011,60(12):123102.
- [3] 李赣,陆光达,敬文勇,等. 氘化锂粉末与 O2, CO2 和

水汽的反应动力学研究[J].核化学与放射化学, 2004,26(2):99-102.

- [4] Dinh L N, Cecala C M, Leckey J H, et al. The effects of moisture on LiD single-crystals studied by temperature-programmed decomposition[J]. J Nucl Mater, 2001, 295: 193-204.
- [5] Dinh L N, Grant D M, Schildbach M A, et al. Kinetic measurement and prediction of the hydrogen outgassing from the polycrystalline LiH/Li<sub>2</sub>O/ LiOH system[J]. J Nucl Mater, 2005, 347: 31-43.
- [6] Plummer G M, Herbst E, de Lucia F C. Submillimeter spectra and molecular constants of <sup>6</sup>LiH, <sup>7</sup>LiH, <sup>6</sup>LiD, and <sup>7</sup>LiD[J]. J Chem Phys, 1984, 81: 4893-4897.
- [7] 徐梅,令狐荣锋,汪荣凯,等.LiH 基态分子(X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>) 的结构与势能函数[J].贵州师范大学学报(自然科 学版),2007,25(1):56-58.
- [8] 谢安东,施德恒,朱遵略,等.LiH 分子X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>、A<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>、B<sup>1</sup>Π态的势能函数[J].化学物理学报,2005,18(5): 776-780.
- [9] 雷洁红,段浩,邢丕峰,等. LiX(X=H,D,T)与水的 反应机理和动力学研究[J].原子能科学技术,2011, 45(10):1165-1169.
- [10] 雷洁红,邢丕峰,唐永建,等.密度泛函理论研究 LiX (X=H,D,T) 体系的热力学性质[J].强激光与粒 子束,2010,22(10):2308-2312.
- [11] 段涛,雷洁红,唐永建.高温高压下 LiD 热力学性质 的密度泛函理论研究[J].原子能科学技术,2011,45 (4):394-397.
- [12] 雷洁红,邢丕峰,唐永建,等.高压下 LiD 热力学性质的密度泛函理论研究[M]//中国核科学技术进展报告.北京:原子能出版社,2009:16-20.
- [13] 钟正坤,张莉,孙颖,等.氢-水同位素交换反应热力学

理论研究[J]. 原子能科学技术,2015,49(2):250-254.

- [14] 耿振铎,樊晓伟,张岩松. XY(H,Li,Na)分子基态的 结构与势能函数[J]. 物理学报,2006,55(5):2175-2179.
- [15] 樊晓伟,耿振铎,张岩松.OH分子基态(X<sup>2</sup>Ⅱ)的结 构与势能函数[J].物理学报,2005,54(12):5614-5617.
- [16] 朱正和. 原子分子反应静力学[M]. 北京:科学出版 社,1996.
- [17] 江文世,吴开映. LiH, BeH 和 BH 基态分子结构与 势能函数[J].四川师范大学学报(自然科学报), 2005,28(4):469-471.
- [18] 李权. 钚化合物分子及分子离子的势能函数和分子 反应动力学[D]. 成都:四川大学,2001.
- [19] 罗文浪,阮文,张莉,等. 氢同位素氚水 T<sub>2</sub>O(X<sup>1</sup>A<sub>1</sub>) 的解析势能函数[J]. 物理学报,2008,57(8):4833-4839.
- [20] 朱正和,俞华根.分子结构与分子势能函数[M].北 京:科学出版社,1997.
- [21] 谢安东,朱正和. BF 分子 X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>, A<sup>1</sup> Π和 B<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> 电子态的势能函数[J]. 化学学报,2005,63(23):2126-2130.
- [22] 许永强,高晓明,张为俊.CuC、CuN分子基态的结构 与分析势能函数[J].物理化学学报,2007,23(7): 1075-1079.
- [23] 张莉,钟正坤,朱志艳,等. 氢同位素双原子分子的 解析势能函数[J]. 化学物理学报,2003,16(6):455-458.
- [24] 王蓉,张莉,蒋刚,等. 基于核运动效应下的 H 同位 素双原子分子的解析势能函数[J]. 原子核物理评 论,2009,26(2):150-153.
- [25] 杜泉, 王玲, 谌晓洪, 等. BeH, H<sub>2</sub> 和 BeH<sub>2</sub> 的分子结构和势能函数[J]. 物理学报, 2009, 58(1):178-184.