

doi:103969/j. issn. 1000-0364. 2013. 01. 003

# CaS 基态( $X^1 \Sigma^+$ ) 结构及势能函数研究

张跃杰<sup>1</sup>, 戴 伟<sup>1,2</sup>

(1. 湖北第二师范学院物理与电子信息学院, 武汉 430205;  
2. 中国科学院武汉物理与数学研究所, 武汉 430071)

**摘 要:** 采用 B3LYP、BP86、B3P86、QCISD、CCSD 方法. 分别选用 6-311G(2df,3pd)、6-311G(2df,2pd)、6-311G(3df,2pd)、6-311G(3df,3pd)、sddall、sdd 基组对 CaS 基态( $X^1 \Sigma^+$ ) 分子进行结构优化. 最后选用最佳基组 B3LYP/6-311G(3df,3pd) 的计算结果. 分别对 Murrell-Sorbie( $i=3,4,5,6,7,8,9$ ) 函数及修正的函数 Murrell-Sorbie+ $C_6$  运用最小二乘法拟合运算, 导出 CaS 分子的力常数( $f_2, f_3, f_4$ ); 最终选用最能反映 CaS 性质的函数 Murrell-Sorbie( $i=9$ ), 计算 CaS 光谱常数( $\omega_e, B_e, \alpha_e, \omega_e \chi_e$ ). 结果表明: 用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数计算出的  $f_2, f_3, f_4$  比选用 Murrell-Sorbie( $i=3,4,5,6,7,8$ ) 及 Murrell-Sorbie+ $C_6$  更接近实验数据; 用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 计算的 CaS 分子光谱常数与理论值非常吻合; CaS 分子运用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数能够准确表达.

**关键词:** CaS; 最小二乘法; 双原子分子; 势能函数

**中图分类号:** O561      **文献标识码:** A      **文章编号:** 1000-0364(2013)01-0014-05

## Structure and potential energy function of the ground state of CaS

ZHANG Yue-Jie<sup>1</sup>, DAI Wei<sup>1,2</sup>

(1. School of Physics and Electronic Information, Hubei University of Education, Wuhan 430205, China;  
2. Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China)

**Abstract:** The equilibrium structure of CaS molecule at the ground state is calculated and optimized using quantum chemistry methods B3LYP, BP86, B3P86, QCISD and CCSD at the 6-311G(2df,3pd), 6-311G(2df,2pd), 6-311G(3df,2pd), 6-311G(3df,3pd), sddall and sdd basis sets. Comparing the results with experiment data, finding the B3LYP/6-311G(3df,3pd) is the best suitable method. Using B3LYP with the basis set 6-311G(3df,3pd) to scan the energies for the ground state of CaS molecule, then having a least square fitted to Murrell-Sorbie( $i=3,4,5,6,7,8,9$ ) and Murrell-Sorbie+ $C_6$  functions, calculating force constants( $f_2, f_3, f_4$ ). Picking out the best function(Murrell-Sorbie  $i=9$ ) to get the spectroscopy constants ( $\omega_e, B_e, \alpha_e, \omega_e \chi_e$ ), the spectroscopy constants are good in agreement with the experimental results.

**Key words:** CaS, diatomic molecules, method of least square, potential energy function

### 1 引 言

原子分子相互作用的势能曲线模型是否合理, 反映了原子分子间的相互作用的客观情况, 直接影

响理论模型和计算方法对物质微观和宏观性质的研究结果. 在分子动力学模拟中, 相互作用势能曲线模型对模拟结果的影响也是最直接最根本的. Ca 又处于元素周期表中化学性质最令人感兴趣元

收稿日期: 2012-09-07

基金项目: 湖北省十二五规划课题(2011B232, 2011B238); 湖北第二师范学院重点课题(B2011A008)

作者简介: 张跃杰(1987-), 男, 河南省三门峡, 在读本科, 物理学专业. E-mail: zhangyueho@qq.com

通讯作者: 戴伟. E-mail: dai13545679420@126.com

素之一, 近年来人们对钙及钙化物的研究主要集中在钙的有机化合物<sup>[1-3]</sup>、钙与神经系统相关性<sup>[4]</sup>、钙与细胞科学<sup>[5]</sup>、新陈代谢<sup>[6]</sup>、材料科学<sup>[7-10]</sup> 等方面. 因此研究钙原子及其钙原子与其他元素相互作用的势能函数及特性成为了较重要的研究课题.

硫化钙在空气中不稳定, 容易被氧化, 呈白色立方系晶体, 氯化钠型结构. 是碱土金属钙的硫化物, 室温下为白色具有臭鸡蛋气味的固体, 含杂质的为淡黄色. 密度 2.600 g/cm(固体), 熔点 2400 °C. 折光率 2.137. 微溶于水, 微溶于醇. 在湿空气中分解, 在干燥空气中则被氧化. 遇酸迅速分解而释出硫化氢. 与氯、碘反应析出元素硫等等, 在加压<sup>[11]</sup>、加热<sup>[12]</sup> 氧化方面, 其化学反应更为复杂, 生成物种类更为繁多. 因此急需建立能够反映 CaS 分子精确势能模型, 为更好的研究 CaS 结构与性质, 从而为更深入的研究 CaS 之反应动力学, 给予坚实的理论支撑.

近些年对 CaS 的研究集中在化学反应性质及应用方面的研究, 而却没有对 CaS 的势能函数及结构方面进行过相关研究. 本文采用 Gaussian 03 软件中的 B3LYP、BP86、B3P86、QCISD、CCSD 方法, 并分别选用基组 6-311G(2df, 3pd)、6-311G(2df, 2pd)、6-311G(3df, 2pd)、6-311G(3df, 3pd)、sddall、sdd 对 CaS 基态( $X^1\Sigma^+$ ) 分子进行结构优化. 选用优化平衡核间距与参考值较吻合的基组 B3LYP/6-311G(3df, 3pd) 对 CaS 进行单点扫描计算. 分别对 Murrell-Sorbie( $i=3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ ) 函数及修正的函数 Murrell-Sorbie +  $C_6$  运用最小二乘法拟合运算, 推导  $f_2, f_3, f_4$ , 结果发现 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 计算的  $f_2, f_3, f_4$  与理论值较其他函数吻合. 运用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 计算 CaS 光谱常数, 结果与参考值吻合很好. 即 CaS 分子运用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数能够准确表达.

## 2 理论计算

### 2.1 CaS 分子基态的离解极限

为了正确表述 CaS 分子基态相对应的势能函数需要合理地确定其离解极限. 根据原子分子静力学原理<sup>[13,14]</sup>, 基于广义 Wigner-Witmer, 由分离原子法构造出 CaS 分子可能的电子状态. CaS 分子为异核双原子分子, 属于  $C_{\infty v}$  群. Ca 原子的基态电子状态为  $^1S_g$ , S 原子的基态电子状态为  $^3P_g$ , 两者均属于  $SU_{(n)}$  群. 当 Ca( $^1S_g$ ) 和 S( $^3P_g$ ) 形成

CaS 时, 其对称性降低,  $SU_{(n)}$  群的不可约表示可以分解为  $C_{\infty v}$  群的不可约表示的直和, 通过直和约化可得  $C_{\infty v}$  群的不可约表示, 即所形成分子的可能电子状态. Ca( $^1S_g$ ) 和 S( $^3P_g$ ) 分别分解为  $C_{\infty v}$  群的不可约表示的直和为

$$\text{Ca}(^1S_g) \oplus \text{S}(^3P_g) = \text{CaS}(X^1\Sigma^+)$$

所以, CaS 的可能电子状态为  $X^1\Sigma^+$ .

### 2.2 CaS 分子基态( $X^1\Sigma^+$ ) 的结构参数

我们采用 Gaussian 03 软件, B3LYP、BP86、B3P86、QCISD、CCSD 方法, 及分别用基组 6-311G(2df, 3pd)、6-311G(2df, 2pd)、6-311G(3df, 2pd)、sddall、6-311G(3df, 3pd)、sdd 分别对 CaS 分子基态( $X^1\Sigma^+$ ) 进行结构优化计算, 计算结果见表 1. 可以看出用 B3LYP/6-311G(3df, 3pd)、B3LYP/6-311G(3df, 2pd) 方法计算的平衡核间距  $R_e$  与参考值<sup>[13]</sup> 吻合很好, 绝对值差值最小仅为 0.00039 nm.

### 2.3 CaS 分子基态( $X^1\Sigma^+$ ) 的势能函数

本文采用 B3LYP 方法, 大基组 6-311G(3df, 3pd) 对 CaS 分子基态在核间距 0.155~1.1 nm 之间扫描 190 个单点势能值. 扫描过程中使用的各种参数, 除 Ca 与 S 原子的核间距是变量外, 其他数与结构优化时严格保持一致. 然后分别利用 Murrell-Sorbie( $i=3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ ) 函数((1)式) 及修正的 Murrell-Sorbie +  $C_6$  函数((2)式) 进行非线性最小二乘法拟合, 拟合相如度如表 2 所示.

$$V(\rho) = -D_e \left[ 1 + \sum_{i=1}^n a_i \rho^i \right] \exp(-a_1 \rho) \quad (1)$$

$(i = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$

$$V(\rho) = -D_e \left[ 1 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + a_3 \rho^3 \right] \cdot \exp(-a_1 \rho) - C_6 / r^6 \quad (2)$$

其中(1)式与(2)式中的  $\rho = r - R_e$ , 这里的  $r$  和  $R_e$  分别为核间距和平衡核间距. 通过拟合分别得到(1)式中的参数  $D_e, a_i$ , 如表 2 所示. 借助这些系数由下列(3), (4), (5), (6)式可计算出 CaS 的各阶力各阶力常数( $f_2, f_3, f_4$ ) 如表 3 所示.

$$f_2 = \frac{d^2V}{dr^2} \Big|_{r=R_e} = D_e(a_1^2 - 2a_2) \quad (3)$$

$$f_3 = \frac{d^3V}{dr^3} \Big|_{r=R_e} = 6D_e(a_1 a_2 - a_3 - \frac{a_1^3}{3}) \quad (4)$$

$$f_4 = \frac{d^4V}{dr^4} \Big|_{r=R_e} = D_e(3a_1^4 - 12a_1^2 a_2 + 24a_1 a_3) (i = 3) \quad (5)$$

$$f_4 = \frac{d^4V}{dr^4} \Big|_{r=R_e} = D_e(3a_1^4 - 12a_1^2a_2 + 24a_1a_3 - 24a_4) \quad (i = 4, 5, 6, 7, 8, 9) \quad (6)$$

拟合(2)式得参数  $D_e, a_1, a_2, a_3, C_6$  如表2所示. 借助这些系数由(7),(8),(9)式可计算出 CaS 的各阶力常数( $f_2, f_3, f_4$ )如表3所示.

$$f_2 = \frac{d^2V}{dr^2} \Big|_{r=R_e} = D_e(\alpha_1^2 - 2\alpha_2) - \frac{42C_6}{R_e^8} \quad (7)$$

$$f_3 = \frac{d^3V}{dr^3} \Big|_{r=R_e} = 6D_e\left(\alpha_1\alpha_2 - \alpha_3 - \frac{\alpha_1^3}{3}\right) + \frac{336C_6}{R_e^9} \quad (8)$$

$$f_4 = \frac{d^4V}{dr^4} \Big|_{r=R_e} = D_e(3\alpha_1^4 - 12\alpha_1^2\alpha_2 + 24\alpha_1\alpha_3) - \frac{3024C_6}{R_e^{10}} \quad (9)$$

表1 CaS 分子基态( $X^1\Sigma^+$ )结构优化结果  
Table 1 Optimal results of the ground state of CaS

方法	结果	CCSD	QCISD	B3P86	BP86	B3LYP	参考值[13]
SDD	$R_e/\text{nm}$	0.24484	0.24624	0.23393	0.23507	0.23579	0.23178
	$E/\text{Hartree}$	-434.23728	-434.24859	-435.52835	-435.06542	-435.01664	—
SDDALL	$R_e/\text{nm}$	0.24413	0.24593	0.23336	0.23462	0.23533	0.23178
	$E/\text{Hartree}$	-46.70955	-46.72218	-47.37293	-47.07511	-47.02785	—
6-311G(2df,3pd)	$R_e/\text{nm}$	0.23369	0.23471	0.22883	0.23033	0.23113	0.23178
	$E/\text{Hartree}$	-1074.75682	-1074.75968	-1076.52765	-1075.92300	-1075.83918	—
6-311G(2df,2pd)	$R_e/\text{nm}$	0.23369	0.23471	0.22883	0.23033	0.23113	0.23178
	$E/\text{Hartree}$	-1074.75682	-1074.75968	-1076.52765	-1075.92300	-1075.83918	—
6-311G(3df,2pd)/6-311G(2df,3pd)	$R_e/\text{nm}$	0.23470	0.23570	0.22919	0.23065	0.23139	0.23178
	$E/\text{Hartree}$	-1074.76610	-1074.76896	-1076.52923	-1075.92455	-1075.84075	—

表2 CaS 的解析势能参数  
Table 2 Parameters of analytical potential energy functions of CaS

函数	De/eV	$a_1$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )	$a_2$ ( $\text{\AA}^{-2}$ )	$a_3$ ( $\text{\AA}^{-3}$ )	$a_4$ ( $\text{\AA}^{-4}$ )/ $C_6$ ( $\text{\AA}^{-4}$ )	$a_5$ ( $\text{\AA}^{-5}$ )	$a_6$ ( $\text{\AA}^{-6}$ )	$a_7$ ( $\text{\AA}^{-7}$ )	$a_8$ ( $\text{\AA}^{-8}$ )	$a_9$ ( $\text{\AA}^{-9}$ )	拟合相近度
(M-S) $i=3$	4.84247	1.37149	-0.57002	0.20049							0.999982808366847
参考数值[13]	4.634	1.24	-0.737	0.442							—
(M-S) $i=4$	4.84247	1.37149	-0.57002	0.20049	0.00000						0.999982808367235
(M-S) $i=5$	4.83441	1.21191	-0.76673	0.31686	-0.04954	0.00408					0.999996694164466
(M-S) $i=6$	4.83781	1.46410	-0.43766	0.16641	0.02237	-0.00921	0.00192				0.999999407064103
(M-S) $i=7$	4.83782	0.95239	-1.05486	0.55454	-0.15041	0.02216	-0.00154	0.00003			0.999999421651899
(M-S) $i=8$	4.83566	1.91621	0.33603	0.14132	0.05052	0.00984	0.02358	-0.00912	0.00146		0.999999134649422
(M-S) $i=9$	4.83627	2.16629	0.84233	0.29504	0.12421	0.00335	0.01074	0.02355	-0.00988	0.00145	0.999999481877835
(M-S)+ $C_6$	4.85646	1.35549	-0.57866	0.19455	-2.51670						0.999985863945263

表2中的第六列  $a_4$  ( $\text{\AA}^{-4}$ )适用于 M-S( $i=3,4,5,6,7,8,9$ )参数值,  $C_6$  ( $\text{\AA}^{-4}$ )适用于(M-S)+ $C_6$  参数值;

表 3 CaS 的各阶力常数计算结果

Table 3 Force constants of the ground state of CaS

函数	$f_2$ ( $\text{eV} \cdot \text{\AA}^{-2}$ )	$f_3$ ( $\text{eV} \cdot \text{\AA}^{-3}$ )	$f_4$ ( $\text{eV} \cdot \text{\AA}^{-4}$ )
(M-S) $i=3$	14.6293	-53.5245	145.6619
(M-S) $i=4$	14.6293	-53.5245	146.3125
(M-S) $i=5$	14.5138	-53.3541	147.2110
(M-S) $i=6$	14.6049	-53.7966	147.0010
(M-S) $i=7$	14.5946	-53.6169	146.2734
(M-S) $i=8$	14.5059	-64.2907	150.0020
(M-S) $i=9$	14.5483	-53.9433	149.8833
(M-S)+C6	14.6721	-53.1593	143.6112
推算值	13.9558	-55.3695	156.8382

由表 2 可知, Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 的拟合近似程度达到:  $R=0.999999481877835$  (完全拟合时拟合近似度为 1) 相对其他几个函数为拟合效果最好的函数, 又由于用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数的各个系数所计算的力常数 ( $f_2, f_3, f_4$ ) 与推算值 (根据参考系数<sup>[13]</sup>利用(3)、(4)、(5)式子推算所得) 整体情况进行比较, Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数的计算结果也比较吻合. 由此我们选用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 来更加准确的计算 CaS 的光谱常数.

由光谱常数的计算公式<sup>[15-19]</sup> (10)、(11)、(12)、(13) 可知, 光谱常数的精确程度与力常数 ( $f_2, f_3, f_4$ ) 关联最大, 由此我们运用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 来精确计算光谱常数.

$$\omega_e = \sqrt{\frac{f_2}{4\pi^2 c^2 \mu}} \quad (10)$$

$$B_e = h/8\pi^2 c \mu R_e^2 \quad (11)$$

$$\alpha_e = -\frac{6B_e^2}{\omega_e} \left(1 + \frac{f_3 R_e}{3f_2}\right) \quad (12)$$

$$\omega_e \chi_e = \frac{B_e}{8} \left[ -\frac{f_4 R_e^2}{f_2} + 15 \left(1 + \frac{\omega_e \alpha_e}{6B_e}\right)^2 \right] \quad (13)$$

式子中  $\mu$  为单个分子的约化质量,  $\omega_e$  为谐振频率,  $\omega_e \chi_e$  非谐振动频率,  $B_e$  为刚性转动因子,  $\alpha_e$  为非刚性振动因子, 计算结果如表 4 所示.

表 4 CaS 的光谱常数计算结果

Table 3 Spectroscopy constants of the ground state of CaS

光谱常数	(M-S) $i=9$	推算值
$B_e / \text{cm}^{-1}$	0.176498	0.175905
$\omega_e / \text{cm}^{-1}$	471.436149	461.736000
$\alpha_e / \text{cm}^{-1}$	-0.000396	-0.000402
$\omega_e \chi_e / \text{cm}^{-1}$	1.323739	1.319286

由表 4 可知, 用 Murrell-Sorbie( $i=9$ ) 函数计算的 CaS 分子的光谱常数 ( $\omega_e, B_e, \alpha_e, \omega_e \chi_e$ ) 与推导值非常吻合.

图 1 给出了函数 Murrell-Sorbie ( $i=9$ ) 与 B3LYP/6-311G(3df,3pd) 方法单点扫描的拟合曲线, 由图可以看出函数 Murrell-Sorbie ( $i=9$ ) 与单点扫描值拟合的很好, 即 Murrell-Sorbie ( $i=9$ ) 能够准确描述 CaS 基态 ( $X^1\Sigma^+$ ) 势能关系.

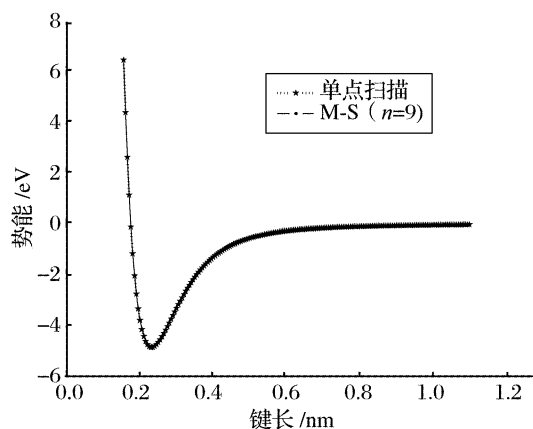
图 1 CaS 基态( $X^1\Sigma^+$ ) 拟合势能曲线

Fig. 1 Potential curve and fitted curve of CaS

### 3 结 论

选用 B3LYP/6-311G(3df,3pd) 方法计算 CaS 分子基态 ( $X^1\Sigma^+$ ) 的势能函数曲线、力常数 ( $f_2, f_3, f_4$ ) 和光谱常数 ( $\omega_e, B_e, \alpha_e, \omega_e \chi_e$ ), 计算结果与参考值吻合很好. 这表明:

(1) 用 Murrell-Sorbie ( $i=9$ ) 函数比 Murrell-Sorbie ( $i=3, 4, 5, 6, 7, 8$ ) 函数及近些年常见的修改函数 Murrell-Sorbie +  $C_6$  更能反映 CaS 分子基态 ( $X^1\Sigma^+$ ) 的势能;

(2) Murrell-Sorbie ( $i=9$ ) 势能函数能较准确的反映 CaS 基态 ( $X^1\Sigma^+$ ) 的结构特征;

(3) 本文为开展 CaS 分子的进一步理论研究提供有效理论依据, 同时也为相关的含硫、钙材料研究提供了重要的理论基础.

#### 参考文献:

- [1] Fu S, Yang L, Li P, *et al.* Aberrant lipid metabolism disrupts calcium homeostasis causing liver endoplasmic reticulum stress in obesity[J]. *Nature*, 2011, 473: 528
- [2] Stefani D D, Raffaello A, Teardo E, *et al.* A forty-

- kilodalton protein of the inner membrane is the mitochondrial calcium uniporter[J]. *Nature*, 2011, 476: 336
- [3] Suzuki J, Umeda M, Sims P J, *et al.* Calcium-dependent phospholipid scrambling by TMEM16F[J]. *Nature*, 2010, 468: 834
- [4] Hoppa M B, Lana B, Margas W, *et al.*  $\alpha 2\delta$  expression sets presynaptic calcium channel abundance and release probability[J]. *Nature*, 2012, 486: 122
- [5] Collina S, Meyer T. A sensor for calcium uptake[J]. *Nature*, 2010, 467: 283
- [6] Swami M. Calcium-mediated control[J]. *Nature Med.*, 2012, 18: 670
- [7] Xiao S Q, Xie G F. Sensitivity analysis and optimization of interatomic potential parameters for perovskites[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2010, 59(7): 4808 (in Chinese) [肖松青, 谢国锋. 钙钛矿铁电体原子势参数的灵敏度分析及优化[J]. 物理学报, 2010, 59: 4808]
- [8] Wang H C, Wang C L, Su W B, *et al.* Synthesis and electrical properties of dual doped  $\text{CaMnO}_3$  based ceramics[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2011, 60(8): 087203-1 (in Chinese) [王洪超, 王春雷, 苏文斌, 等. 双掺杂锰酸钙基热电陶瓷的制备及电学性能研究[J]. 物理学报, 2011, 60(8): 087203-1]
- [9] Xiang J, Wei T, Peng T G, *et al.* Preparation and electrical properties of the novel mixed ionic-electronic conductors  $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Al}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  [J]. *Acta Phys. Sin.*, 2008, 58(5): 3402 (in Chinese) [向军, 卫婷, 彭田贵, 等. 物理学报, 2008, 58(5): 3402]
- [10] Zheng Y Y, Deng H T, Wan J, *et al.* Bandgap energy tuning and photoelectrical properties of self-assembly quantum well structure in organic-inorganic hybrid perovskites[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2011, 60(6): 067306-1 (in Chinese) [郑莹莹, 邓海涛, 万静, 等. 有机-无机杂化钙钛矿自组装量子阱结构的能带调控和光电性能的研究[J]. 物理学报, 2011, 60(6) 067306-1]
- [11] Li W, Han X Y, Chen H K, *et al.* Thermogravimetric research on reaction of  $\text{CaO}$  with  $\text{SO}_2$  in intret atmosphere under pressure[J]. *J. China University of Ming&Teachnology*, 2002, 31(4): 363 (in Chinese) [李文, 韩翔宇, 陈皓侃, 等. 加压惰性气氛下  $\text{CaO}$  和  $\text{SO}_2$  反应的热重研究[J]. 中国矿业大学学报, 2002, 31(4): 363]
- [12] Xiao H P, Zhou J H, Liu J Z, *et al.* Research on  $\text{CaS}$  oxidation reaction with thermogravimetric analysis[J]. *J. Zhejiang University: Engineering Science*, 2006, 40(6): 982 (in Chinese) [肖海平, 周俊虎, 刘建忠, 等.  $\text{CaS}$  氧化反应特性的热重研究[J]. 浙江大学学报: 工学版, 2006, 40(6): 982]
- [13] Zhu Z H, Yu H G. *Molecular structure and molecular potential function* [M]. Beijing: Science Press, 1997 (in Chinese) [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]
- [14] Zhu Z H. *Atomic and molecular reaction statics* [M]. Beijing: Science Press, 1996 (in Chinese) [朱正和. 原子分子反应静力学[M]. 北京: 科学出版社, 1996]
- [15] Zhang Y J, Dai W, Dong R X, *et al.* Contrastive studies of potential energy functions for  $\text{B}_2$  [J]. *J. Sichuan University: Natural Science Edition*, 2012, 49(3): 644 (in Chinese) [张跃杰, 戴伟, 董润雄, 等.  $\text{B}_2$  分子势能函数对比研究[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2012, 49(3): 644]
- [16] Wang L, Liu Y Y, Cao Y, *et al.* Study on Potential energy function and spectrum constants of  $\text{ZnH}(n=0, 1, 2)$  [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2010, 27(4): 673 (in Chinese) [王玲, 刘议蓉, 曹勇, 等.  $\text{ZnH}(n=0, 1, 2)$  双原子分子离子光谱与分析势能函数研究[J]. 原子与分子物理学报, 2010, 27(4): 673]
- [17] Yang S L, Ren T Q, Hou S W, *et al.* Study on the potential energy function and spectroscopic constants for the ground state ( $X^1\Sigma^+$ ) of  $\text{SiO}$ ,  $\text{SiS}$  molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2012, 29(1): 12 (in Chinese) [杨士玲, 任廷琦, 侯圣伟, 等.  $\text{SiO}$ ,  $\text{SiS}$  分子基态( $X^1\Sigma^+$ )的势能函数与光谱常数的研究[J]. 原子与分子物理学报, 2012, 29(1): 12]
- [18] Huang D H, Cheng X H, Lu W D, *et al.* The potential energy function and Spectrum data for  $X^1\Sigma^+$ ,  $A^1\Sigma^+$  and  $a^3\Sigma^+$  states of  $\text{HeH}^+$  molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2012, 29(2): 259 (in Chinese) [黄多辉, 程晓洪, 鲁伟员, 等.  $\text{HeH}^+$  分子  $X^1\Sigma^+$ ,  $A^1\Sigma^+$  和  $a^3\Sigma^+$  态的势能函数与光谱常数研究[J]. 原子与分子物理学报, 2012, 29(2): 259]
- [19] Xun Y Q, Peng W C, W H. Structures and analytical potential energy functions of the ground states of  $\text{YnO}(n=16, 17, 18)$  molecules [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2011, 28(6): 1003 (in Chinese) [许永强, 彭伟成, 武华.  $\text{YnO}(n=16, 17, 18)$  分子基态的结构与分析势能函数[J]. 原子与分子物理学报, 2011, 28(6): 1003]