

عنوان مقاله:

رویه انرژی پتانسیل، ثابت های نیروی مرتبه چهارم و ترازهای ارتعاشی آنیون کلر دی اکسید

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 21، شماره 4 (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

علیرضا شایسته - گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

الهه فلاطونی - گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

مریم سادات مطلبی پور - گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

خلاصه مقاله:

رویه انرژی پتانسیل یون سه اتمی ClO_2^- در حالت پایه الکترونی با محاسبات آغازین به روش خوشه جفت شده (CCSD(T)) محاسبه شده است. محاسبات برای ۱۲۰۰ نقطه در رویه انرژی پتانسیل انجام شده و با برازش نقاط پتانسیل محاسبه شده در عبارت انرژی پتانسیل بر حسب مختصات درونی، ثابت های نیروی مرتبه دوم، سوم و چهارم تعیین شدند. با به کارگیری نظریه اختلال مرتبه دوم ارتعاشی چرخشی، بسامد های ارتعاشی هماهنگ، ثابت های ناهماهنگی ارتعاشی و تعدادی دیگر از ثابت های طیف سنجی برای این آنیون محاسبه شده و بسامد های ارتعاشی بنیادی با صحت بالا تعیین شدند. همچنین، انرژی های ۳۰ تراز ارتعاشی پایینی با در نظر گرفتن ثابتهای ناهماهنگی محاسبه شده اند.

کلمات کلیدی:

رویه انرژی پتانسیل، روش خوشه جفت شده، ثابت های نیروی مرتبه چهارم، ثابت ناهماهنگی ارتعاشی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1519385>

