

# LiC 分子基态及其低电子激发态的 多参考组态相互作用方法研究\*

陈恒杰<sup>1)†</sup> 程新路<sup>2)</sup> 唐海燕<sup>1)</sup> 王全武<sup>1)</sup> 苏欣纺<sup>2)</sup>

1) (重庆科技学院数理系, 重庆 401331)

2) (四川大学原子与分子物理所, 成都 610065)

(2009 年 9 月 6 日收到; 2009 年 10 月 20 日收到修改稿)

采用包含 Davidson 修正的多参考组态相互作用(MRCI+Q)方法结合 6-311++G(3df,3pd) 基组计算了 LiC 分子基态( $X^4\Sigma^-$ )以及五个低电子激发态( $a^2\Pi$ ,  $b^2\Delta$ ,  $c^2\Sigma^-$ ,  $d^2\Sigma^+$ ,  $A^4\Pi$ )的势能曲线. 将得到的势能曲线拟合到 Murrell-Sorbie 解析势能函数形式, 确定了对应态的平衡结构  $R_e$ 、谐振频率  $\omega_e$  和离解能  $D_e$  等光谱数据, 计算值与仅有的几个其他结果进行了比较. 通过求解核运动的薛定谔方程首次报道了 LiC 分子几个低电子态在  $J=0$  下的振动能级、转动惯量和六个离心畸变常数( $D_v$ ,  $H_v$ ,  $L_v$ ,  $M_v$ ,  $N_v$  和  $O_v$ ).

**关键词:** LiC, 光谱常数, 解析势能函数, 振动能级

**PACC:** 3120T, 3150, 3310

## 1. 引 言

激发态分子特性及其势能函数是研究原子分子碰撞和分子反应动力学的基础, 也是研究分子稳定性的依据, 在辐射化学、光谱学以及激光化学等方面有着广泛的应用<sup>[1-3]</sup>. LiC 或 LiB 蒸气分子能大大增强固体 H<sub>2</sub> 的冲击力<sup>[4,5]</sup>, 成为很有发展潜力的火箭燃料, 已越来越受到人们的关注. 然而实验科学家目前更关注实际应用, 对其分子特性和光谱数据的深入研究还未见相关报道. 理论方面, 1982 年 Mavridis 等<sup>[6,7]</sup> 首次利用多参考组态相互作用(MRCI)方法研究了 LiC 分子, 并给出了部分电子态特性; 之后 Boldyrev 等<sup>[8]</sup> 用单参考态二阶微扰理论 MP2 结合 6-311+G\* 基组对包含 Li 原子的中性双原子分子及其离子进行了研究; 为了对 LiC 分子激发态特性有所了解, Ricca 等<sup>[4]</sup> 用内收缩多参考组态相互作用方法(ICMRCI)报道了 LiC 的系列电子态, 基组采用了 Müller 等<sup>[9]</sup> 建议的核极化势 CPP; 1999 年, Machado 等<sup>[10]</sup> 用 MRCI 计算得到了 LiC 分子的第一电离势和电子亲和力. 由于常见的单参考态从头算方法很难应用到开壳层及其激发

态体系, 相应文献也非常少, 而上述文献使用的 MRCI 方法都未应用 Davidson 修正外推到完全组态相互作用(FCI)极限, 基组除了 Machado 等<sup>[10]</sup> 采用的相对较大的原子轨道基 ANO 外, 其余文献使用的基组均较小, 计算的光谱数据也仅局限于平衡核间距和谐振频率, 关于 LiC 分子激发态的光谱参数、解析势能函数以及振动能级还未见相关报道.

本文采用包含 Davidson 修正的多参考组态相互作用(MRCI+Q)方法, 计算了 LiC 分子基态及其几个低电子激发态的势能与曲线(PECs), 在此基础之上获得了这些态的解析势能函数和理论光谱数据, 并和已有的计算结果进行了比较. 首次报道了每个电子态下  $J=0$  时的振动能级、转动惯量和六个离心畸变常数.

## 2. 计算方法

单参考态方法有着广泛的应用背景, 但其在处理开壳层体系时常难以得到分子合理的离解极限, 对激发态的研究则更加困难; FCI 是最精确的理论方法, 然而即使用最小的基函数处理小分子, 计算量也会大得惊人; 基于 CASSCF 计算的 MRCI 方法

\* 国家自然科学基金(批准号: 10676025)资助的课题.

E-mail: nwwolfchj@gmail.com

充分考虑了电子的动力学相关, 自动处理对相关能有重要贡献的组态函数(CSF), 既能够弥补单参考态方法的缺陷, 同时在计算资源和计算精度之间取得了平衡, 已被广泛应用于小分子势能曲线的研究<sup>[11-15]</sup>.

本文首先进行 CASSCF 计算以便获取 MRCI 计算所需的参考分子轨道, 在 MRCI 计算中由于大小一致性产生的误差通过 Davidson 修正来处理. 所有计算中取 C 原子的  $2s^2, 2p^2$  和 Li 原子的  $2s$  五个外价层电子做为活性电子, 最外层的三个价轨道和九个最低虚轨道共十二个分子轨道作为活性轨道. 基组采用 Pople 等<sup>[16]</sup>使用的 6-311G, 弥散函数和极化函数分别被加入最终构成 6-311 + + G(3df, 3pd), 其中 Li 和 C 原子的基函数 [12s6p2d1f] 被收缩到 [5s4p2d1f] 形式. 激发组态采用全部单激发和双激发(CISD)的模式, 二重态计算约从 1000000 个 CSF 中选取 70000 个组态(Configurations), 四重态计算则从约 1000000 个 CSF 中选取 50000 个组态参与到最终的组态相互作用(CI)计算. 扫描出最低的六个二重态和三个四重态的九个根即六个电子态的 PECs. 所有计算采用 ORCA 软件包完成<sup>[17]</sup>.

### 3. 解析势能函数及其光谱常数

对双原子分子的解析势能函数已有大量的形式被提出, Murrell-Sorbie (MS)<sup>[18]</sup> 解析势能函数能很好地描述大多数双原子分子的长程和短程相互作用, 被认为是目前最好的解析势能函数之一并被广泛应用<sup>[19-22]</sup>,

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

式中,  $D_e$  为离解能;  $\rho = R - R_e$ , 其中  $R$  为核间距,  $R_e$  为平衡核间距; 式中的系数  $a_i$  与力常数之间的关系为

$$f_2 = D_e (a_1^2 - 2a_2), \quad (2)$$

$$f_3 = 6D_e (a_1 a_2 - a_3 - a_1^2/3), \quad (3)$$

$$f_4 = D_e (2a_1^4 - 12a_1^2 a_2 - 24a_1 a_3). \quad (4)$$

由上述力常数进而可得到光谱常数, 其关系如下:

$$\omega_e = \sqrt{\frac{f_2}{4\pi^2 \mu c^2}}, \quad (5)$$

$$B_e = h/(8\pi c \mu R_e^2), \quad (6)$$

$$\alpha_e = -\frac{6\beta_e^2}{\omega_e} \left(1 + \frac{f_3 R_e}{3f_2}\right), \quad (7)$$

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

$$D_{\text{rot}} = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2}, \quad (9)$$

式中,  $\mu$  为分子的约化质量,  $c$  为光速,  $\omega_e$  为谐振频率,  $\omega_e \chi_e$  为非谐振频率,  $B_e$  为刚性转动因子,  $\alpha_e$  为非刚性转动因子,  $D_{\text{rot}}$  为转动常数.

### 4. 结果及讨论

图 1 和图 2 分别示出了 LiC 分子最低六个电子态在 CASSCF 和 MRCI + Q 水平下的势能曲线, 每条曲线由 128 个从头计算点组成, 核间距范围为 1.0—8.0 Å (1 Å = 0.1 nm). 可以看出: LiC 分子的基态为四重  $X^4\Sigma^-$  态, 与文献<sup>[4-8]</sup> 结果一致, 二重激发态的第一和第二个根简并形成  $a^2\Pi$  态, 同样四重态的第二和第三个根能量一致形成简并的  $A^4\Pi$  激发态, 这是一个典型的排斥势能曲线, 其电子态难以稳定存在, 实验上发现比较困难. CASSCF 结果在分子离解之前其离解极限不能完全趋于一致, 可能的原因是其仅考虑了参考态之间的静态关联能. 由于 MRCI + Q 还考虑了多个参考态之间的动态关联效应, 它不仅能给出统一的离解极限, 更符合物理规律, 相应其势能曲线比 CASSCF 更光滑, 总能量也更低. 最终六个电子态趋于两个离解通道:  $b^2\Delta$  和  $d^2\Sigma^+$  离解为  $C(^1D) + Li(^2S)$ , 其余四个电子态的离解通道则为  $C(^3P) + Li(^2S)$ .

为了得到 LiC 各态的解析势能函数, 首先由其势能曲线三次样条插值获得各态的平衡结构, 在此基础上得到谐振频率, 相应的拟合系数列于表 1 (由于  $A^4\Pi$  态为一排斥态, 不存在能量极小点, 这里我们没有给出其拟合系数), 拟合效果见图 3. 方均根误差(RMS)可以评价拟合的质量, 由表 1 可以看到,  $X^4\Sigma^-$  的拟合误差最小对应的 RMS 仅为  $17.2 \text{ cm}^{-1}$ , 最大的 RMS 来源于  $b^2\Delta$  态的  $114 \text{ cm}^{-1}$  也远小于化学精度  $349.8 \text{ cm}^{-1}$ . 分子间距较小时, 虽然拟合值与从头算值的绝对误差较大, 但由于其能量绝对值在这些位置非常大, 对应的相对误差依然很小, 如图 3(j) 的第一个点对应分子间距为  $1.3 \text{ Å}$ , 其能量为  $9658 \text{ cm}^{-1}$ . 此时拟合的误差绝对值为  $182 \text{ cm}^{-1}$ , 而相对误差仅为  $1.88\%$ , 拟合结果仍然是准确的, 表明目前拟合的解析势能函数能可靠地表示从头算结果.

表 2 列出了 LiC 分子基态和几个低激发态的光谱常数和其研究结果, 其中部分电子态的  $D_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$  和  $D_{rot}$  是首次报道. 对于  $X^4\Sigma^-$  态目前计算的平衡结构为 1.896 Å, 这与 Machado 等<sup>[10]</sup> 的多参考单双激发组态相互作用方法 (MRSDCI) 结果 1.897 Å 完全一致, 两者的离解能也仅差 0.01 eV, 不仅如此两者计算的谐振频率均为 688  $\text{cm}^{-1}$ . 遗憾的是 Machado 等并没有关于激发态的报道, 我们计算的谐振频率结果与 Ricca 等<sup>[4,5]</sup> 的 ICMRCI 结果也符合得相当好. Boldyrev 等<sup>[8]</sup> 利用二阶微扰理论/包含非迭代三激发的单双组态相互作用 (MP2/QCISD(T)) 报道的核间距为 1.884 Å, 是所有计算中最小的, 703  $\text{cm}^{-1}$  的谐振频率却是目前所见文献中最大的, 可能的原因除了使用较小的  $6-311+G^*$  外, 最重要的是对开壳层体系单参考态处理本身存在一定的缺陷, 这点在  $a^2\Pi$  态表现得更加明显.  $a^2\Pi$  态的离解能为 1.21 eV, 平衡核间距为 2.060 Å, 与 ICMRCI 的 2.064 Å 仅差 0.004 Å, 对于谐振频率 MP2/QCISD(T) 给出了一个相当大的值 847  $\text{cm}^{-1}$ , 目前的计算为 497  $\text{cm}^{-1}$ , 与 MRCI 的 476  $\text{cm}^{-1}$  基本一致. 更高的激发态除了 ICMRCI 关于平衡核间距的报道外, 目前没有任何其他光谱常数文献报道. 我们首次报道了各态的全局解析势能函数

以及光谱常数  $D_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$  和  $D_{rot}$ .  $b^2\Delta$  态的势阱相对较深, 离解能大约为 2.37 eV, 在 1.893 Å 附近, 其能量穿透  $c^2\Sigma^-$  电子态最终离解为  $C(^1D) + Li(^2S)$ , 对应的谐振频率为 687  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$  和  $D_{rot}$  的值分别为 1.72, 1.05,  $1.76 \times 10^{-2}$  和  $0.99 \times 10^{-5} \text{cm}^{-1}$ .  $c^2\Sigma^-$  态的势阱在六个电子态中最浅, 其离解能仅有 0.89 eV, 说明该态最容易受到外界干扰而解离,  $c^2\Sigma^-$  和  $d^2\Sigma^+$  光谱参数可见表 2. 几个激发态的激发能依次为 1.44, 1.52, 1.68, 2.17 和 3.16 eV. 由于目前还没有相关的实验报道, 我们的理论估计为 LiC 的实验和其他理论研究提供了有用的依据.

在从头算点势能曲线基础之上, 采用 Le Roy 的插值法预测了 LiC 分子五个低电子态在  $J=0$  下的振动能级, 结果见表 3. 所有结果利用 Le Roy 的 Level8.0<sup>[23]</sup> 程序计算得到. 可以看到基态  $X^4\Pi$  的势阱最深, 其共有最多的 47 个振动能级被发现,  $c^2\Sigma^-$  具有最浅的势阱, 其离解能较小, 对应的振动能级数目为 28 个. 我们也计算了每个能级对应的转动惯量  $B_v$  被一并列入表 3. 鉴于篇幅的限制, 计算的六个离心畸变常数不在此列出, 如有需要, 请直接向作者索取. 这些能级为在实验上找到对应的跃迁提供了理论依据.

表 1 LiC 分子的 MS 势能函数参数

	$a_1/\text{\AA}^{-1}$	$a_2/\text{\AA}^{-2}$	$a_3/\text{\AA}^{-3}$	$a_4/\text{\AA}^{-4}$	$a_5/\text{\AA}^{-5}$	$a_6/\text{\AA}^{-6}$	$a_7/\text{\AA}^{-7}$	$a_8/\text{\AA}^{-8}$	$a_9/\text{\AA}^{-9}$	RMS/ $\text{cm}^{-1}$
$a^2\Pi$	5.50	13.1	18.4	20.3	23.1	13.7	-6.71	-2.87	6.97	40.1
$b^2\Delta$	4.80	9.75	13.2	15.2	9.70	-1.99	3.61	8.20	-3.21	114
$c^2\Sigma^-$	3.83	4.27	2.07	-0.85	-1.14	1.24	0.39	-0.45	0.11	8.90
$d^2\Sigma^+$	4.04	6.24	5.55	1.63	0.56	6.80	3.16	-4.91	1.15	108
$X^4\Sigma^-$	3.66	5.21	4.73	2.91	1.34	0.88	0.05	-0.52	0.13	17.2
$A^4\Pi$	排斥态									

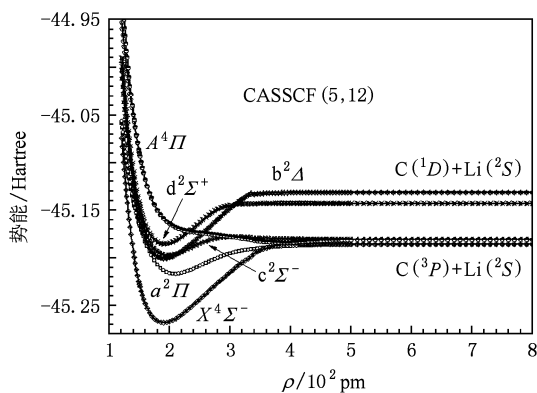


图 1 LiC 分子的 CASSCF(5,12) 势能曲线 (1 Hartree = 27.212 eV)

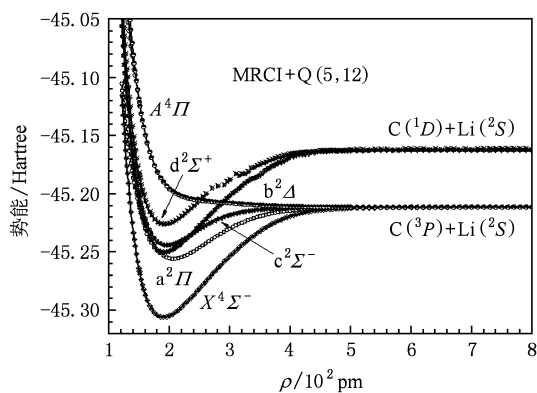
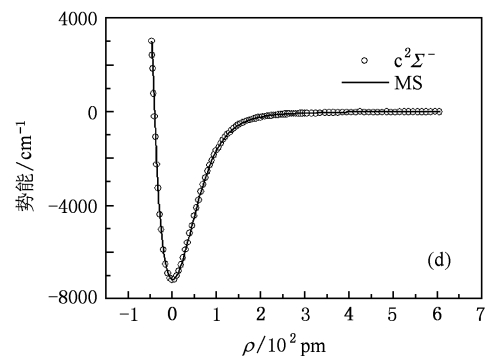
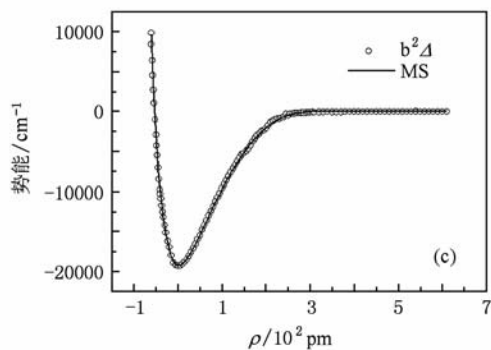
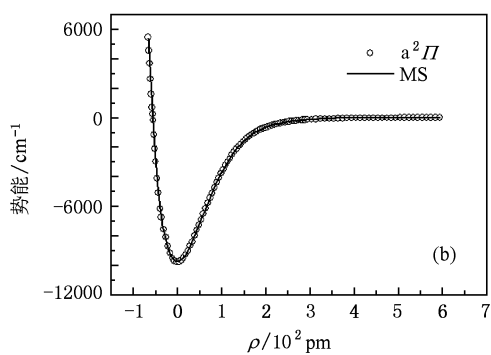
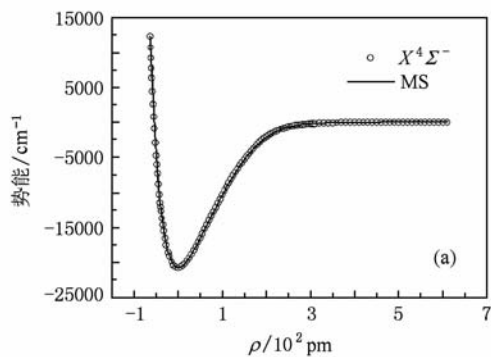


图 2 LiC 分子的 MRCI+Q(5,12) 势能曲线

表 2 LiC 分子的光谱数据

		$T_e/\text{eV}$	$D_e/\text{eV}$	$R_e/\text{\AA}$	$\omega_e/\text{cm}^{-1}$	$\omega_e X_e/\text{cm}^{-1}$	$B_e/\text{cm}^{-1}$	$\alpha_e/10^{-2}\text{cm}^{-1}$	$D_{\text{rot}}/10^{-5}\text{cm}^{-1}$
$a^2\Pi$	本文结果	1.44	1.21	2.060	497	0.99	0.90	0.78	1.19
	ICMRCI			2.064	534				
	MRCI + CPP			2.046	550				
	MRCI			2.152	476				
	MP2/QCISD(T)			2.047	847				
$b^2\Delta$	本文结果	1.52	2.37	1.911	687	1.72	1.05	1.76	0.99
	ICMRCI			1.918					
$c^2\Sigma^-$	本文结果	1.68	0.89	1.956	579	7.38	1.00	1.93	1.20
	ICMRCI			1.951					
$d^2\Sigma^+$	本文结果	2.17	1.76	1.915	653	-2.38	1.05	1.31	1.07
	ICMRCI			1.924					
$X^4\Sigma^-$	本文结果	0.0	2.57	1.896	688	6.90	1.07	1.58	1.02
	ICMRCI		2.52	1.901	673				
	MRCI + CPP		2.61	1.884	691				
	MRCI		2.21	1.914	665				
	MP2/QCISD(T)		2.58	1.884	703				
	MRSDCI		2.56	1.897	688				
$A^4\Pi$	本文结果	3.16							排斥态



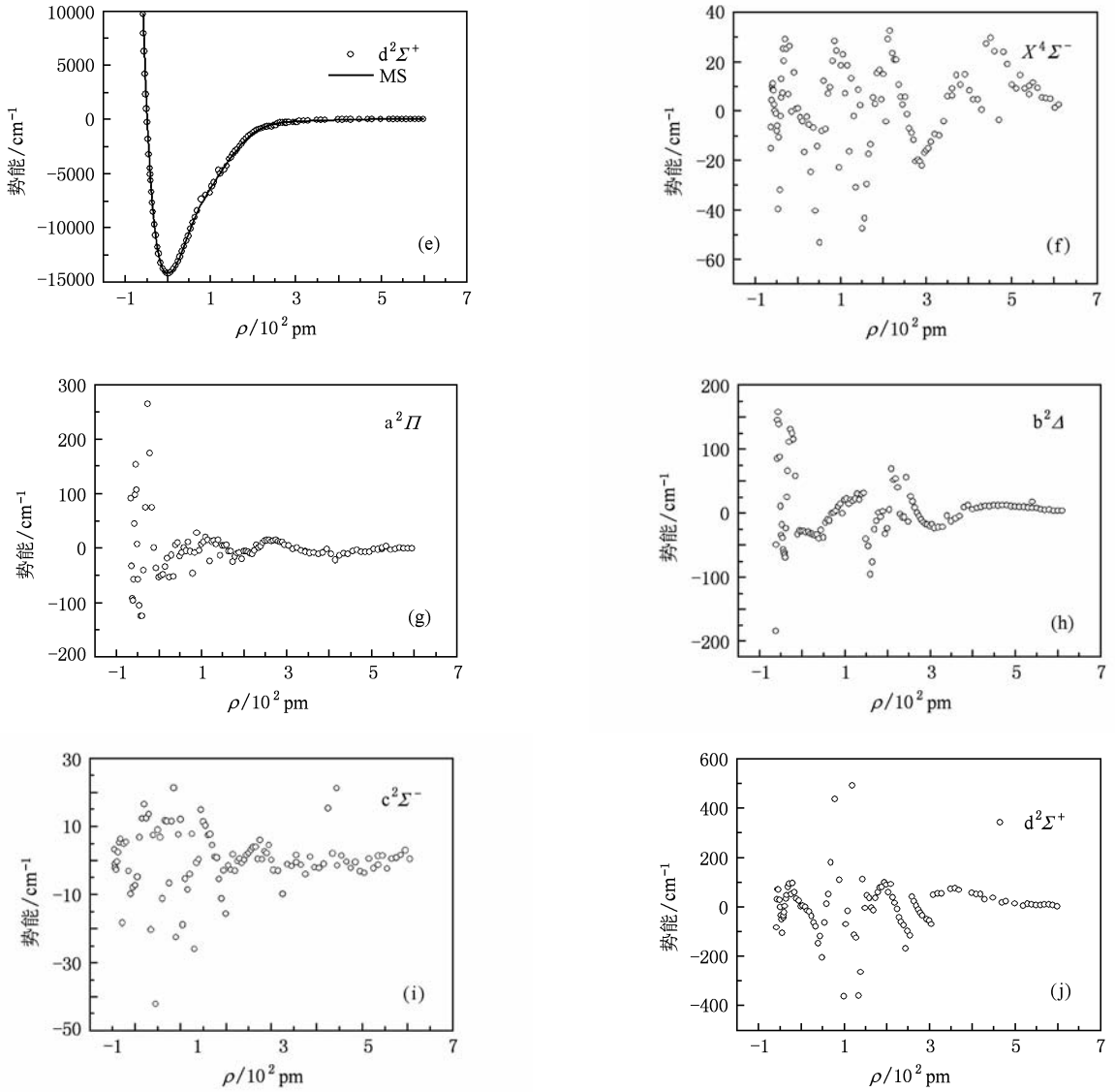


图3 LiC 分子的 MRCI+Q(5,12) 势能曲线拟合 (a)–(e) 为各态 PECs 拟合图(圈表示从头算结果, 直线为 MS 拟合结果), (f)–(j) 为 (a)–(e) 相应态的拟合误差图

表3 MRCI+Q 理论水平下 LiC 分子几个电子态的振动能级和转动惯量 ( $J=0$ )

$\nu$	$X^4\Sigma^-$		$a^2\Pi$		$b^2\Delta$		$c^2\Sigma^-$		$d^2\Sigma^+$	
	$E_\nu$	$B_\nu$	$E_\nu$	$B_\nu$	$E_\nu$	$B_\nu$	$E_\nu$	$B_\nu$	$E_\nu$	$B_\nu$
1	1022.5	1.0340	792.3	0.8741	1045.0	1.0061	870.5	0.9663	979.3	1.0107
2	1685.7	1.0171	1293.9	0.8631	1730.0	0.9808	1418.8	0.9445	1607.5	0.9938
3	2342.2	0.9945	1782.9	0.8587	2400.3	0.9623	1948.7	0.9223	2224.2	0.9724
4	2998.2	0.9704	2256.3	0.8532	3046.6	0.9475	2462.3	0.9005	2832.1	0.9493
5	3656.6	0.9421	2710.4	0.8465	3675.8	0.9317	2963.1	0.8756	3433.1	0.9247
6	4313.3	0.9155	3149.3	0.8299	4299.5	0.9080	3449.3	0.8474	4036.3	0.9001
7	4972.7	0.8883	3583.6	0.8166	4923.2	0.8820	3916.6	0.8131	4642.5	0.8760
8	5629.5	0.8632	4017.4	0.7886	5548.1	0.8577	4361.8	0.7833	5251.6	0.8487
9	6283.2	0.8371	4440.0	0.7680	6160.0	0.8281	4786.8	0.7432	5838.4	0.8162
10	6919.6	0.8123	4856.7	0.7413	6762.7	0.8104	5181.8	0.7126	6419.2	0.7975



## 5. 结 论

利用 MRCI + Q 方法研究了 LiC 基态以及多个低电子激发态的全空间势能曲线, 获得了其分子结构, 对于基态我们计算的平衡核间距和谐振频率与 MRSDCI 结果完全一致, 在更多态的平衡核间距问

题上目前计算与 ICMRCI 趋于一致. 在此基础上, 我们首次报道了 LiC 多个态的解析势能函数, 并获得了其光谱常数, 同时也得到了所研究电子态下的振动能级、转动惯量和六个离心畸变常数. 本工作为 LiC 分子以后的实验和其他理论研究提供了依据. 建立的势能函数可利用到原子分子碰撞、反应动力学以及辐射化学的研究当中.

- [1] Luo D L, Meng D Q, Zhu Z H 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2438 (in Chinese) [罗德礼、蒙大桥、朱正和 2003 物理学报 **52** 2438]
- [2] Gao F, Yang C L, Zhang X Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2547 (in Chinese) [高峰、杨传路、张晓燕 2007 物理学报 **56** 2547]
- [3] Liu Y F, Xu H J, Wu Y N, Sun J F, Cong S L, Han K L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1749 (in Chinese) [刘玉芳、徐后菊、吴言宁、孙金锋、从书林、韩克利 2004 物理学报 **53** 1749]
- [4] Ricca A, Bauschlicher C W 1995 *Chem. Phys. Lett.* **244** 32
- [5] Ricca A, Bauschlicher C W 1995 *Chem. Phys. Lett.* **241** 241
- [6] Mavridis A, Harrison J F 1982 *J. Phys. Chem.* **86** 1979
- [7] Mavridis A, Harrison J F 1982 *J. Am. Chem. Soc.* **104** 3827
- [8] Boldyrev A I, Simons J, Schleyer R 1993 *J. Chem. Phys.* **99** 8793
- [9] Müller W, Flesch J, Meyer W 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 3297
- [10] Machado F B C, Bravo R, Roberto-Neto O 1999 *J. Mol. Stru. (Theochem)* **464** 7
- [11] Li A Y, Wang Y B, Dou Y S, Wen Z Y 2007 *Sci. Chin. Ser. B* **37** 318 (in Chinese) [李安阳、王育彬、豆育升、文振翼 2007 中国科学, B 辑 **37** 318]
- [12] Qian Q, Yang C L, Gao F, Zhang X Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4420 (in Chinese) [钱琪、杨传路、高峰、张晓燕 2007 物理学报 **56** 4420]
- [13] Bian W S, Liu C B, Werner H J 2000 *Sci. Chin. Ser. B* **30** 473 (in Chinese) [边文生、刘成卜、Werner H J 2000 中国科学, B 辑 **30** 473]
- [14] Wang X Q, Yang C L, Su T, Wang M S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6873 (in Chinese) [王新强、杨传路、苏涛、王美山 2009 物理学报 **58** 6873]
- [15] Huang D H, Wang F H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6091 (in Chinese) [黄多辉、王藩侯 2009 物理学报 **58** 6091]
- [16] Krishnan R, Binkley J S, Seeger R, Pople J A 1980 *J. Chem. Phys.* **72** 650
- [17] Neese F 2007 Version 2. 6. 35 February 2007 ORCA — *An ab initio*, DFT and semiempirical SCF-MO package —
- [18] Zhu Z H, Yu H G 1997 *Molecular Structure and Potential Energy Function* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [朱正和、俞华根 1997 分子结构与势能函数(北京:科学出版社)]
- [19] Zhu J L, Ren T Q, Wang Q M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1544 (in Chinese) [朱吉亮、任廷琦、王庆美 2009 物理学报 **58** 1544]
- [20] Linghu R F, Li J, Lü B, Xu M, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 0185 (in Chinese) [令狐荣锋、李劲、吕兵、徐梅、杨向东 2009 物理学报 **58** 0185]
- [21] Xu G L, Lü W J, Xiao X H, Zhang X Z, Liu Y F, Zhu Z L, Sun J F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7577 (in Chinese) [徐国亮、吕文静、肖小红、张现周、刘玉芳、朱遵略、孙金锋 2008 物理学报 **57** 7577]
- [22] Du Q, Wang L, Chen X H, Wang H Y, Gao T, Zhu Z H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 0178 (in Chinese) [杜泉、王玲、谌晓洪、王红艳、高涛、朱正和 2009 物理学报 **58** 0178]
- [23] Le Roy R J 2007 'Level8.0: A Computer Program for Solving the Radial Schrödinger Equation for Bound and Quasibound Levels', *University of Waterloo Chemical Physics Research Report* No. CP-663

# Multi-reference configuration interaction of the ground and low-lying excited states of LiC<sup>\*</sup>

Chen Heng-Jie<sup>1)†</sup> Cheng Xin-Lu<sup>2)</sup> Tang Hai-Yan<sup>1)</sup> Wang Quan-Wu<sup>1)</sup> Su Xin-Fang<sup>2)</sup>

1) (Department of Mathematics and Physics, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing 401331, China)

2) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 6 September 2009; revised manuscript received 20 October 2009)

## Abstract

The potential energy curves (PECs) for the ground electronic state  $X^4\Sigma^-$  and five low-lying excited electronic states ( $a^2\Pi$ ,  $b^2\Delta$ ,  $c^2\Sigma^-$ ,  $d^2\Sigma^+$ ,  $A^4\Pi$ ) of LiC have been calculated using the multiconfiguration reference configuration interaction method including Davidson correction (MRCI + Q). And PECs were fitted to analytical Murrell-Sorbie potential function to deduce the spectroscopic parameters of equilibrium bond length  $R_e$ , rotation coupling constant  $\omega_e$ , anharmonic constant  $\omega_e x_e$ , equilibrium rotation constant  $B_e$  and vibration-rotation coupling constant  $\alpha_e$ . Those values were also compared with the other results currently available. By solving the radial Schrödinger equation of nuclear motion, the vibration levels, inertial rotation constant and six centrifugal distortion constants ( $D_v$ ,  $H_v$ ,  $L_v$ ,  $M_v$ ,  $N_v$ , and  $O_v$ ) are reported for the first time.

**Keywords:** LiC, spectroscopic constants, analytical potential energy function, vibrational level

**PACC:** 3120T, 3150, 3310

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10676025).

† E-mail: nwwolfchj@gmail.com