

用代数方法精确研究 HF 分子 $B^1\Sigma$ 的振转能谱*

樊群超 孙卫国† 渠双双

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2007 年 9 月 29 日收到, 2007 年 12 月 4 日收到修改稿)

基于代数方法(algebraic method)可以获得双原子分子的包含最高振动能级在内的所有高阶振动能级的精确数值这一事实,又提出了一种新的代数方法(algebraic method 2)来精确研究双原子分子电子态的振转能谱和转动常数.以 HF 分子的 $B^1\Sigma$ 电子态为例,应用 algebraic method 2 方法研究了该电子态的振动量子数从 $\nu = 0$ 到 $\nu = 10$ 的所有振转能谱,获得了与实验值符合得非常好的理论结果.

关键词:代数方法,双原子分子,振转能级

PACC: 3310, 3520P

1. 引 言

分子的振转能级在分子光谱结构和动力学性质的研究中是非常重要的物理量^[1].转动中的分子会导致分子的各向异性现象,而且碰撞时的相互作用和冷凝耦合都在很大程度上决定于分子的振转状态^[2].无论是研究考虑了振动和转动情况下的反应截面和反应概率^[3]还是研究分子光谱带的分布和谐振子的性质^[4],都需要精确地计算分子的完全振转能级,而且精确的完全振转能级对于鉴定宇宙空间的各种元素也起着很重要的作用.另外,对于一个振动带,精确的高激发态的振转能级数据对于定量地研究很多物理过程,例如,分子内部的振动再分配、单分子的相互作用、碰撞能量转移^[5]等等,都是非常重要的.

无论在实验上还是理论上,人们对许多双原子分子的转动态和振转能级都作了大量的研究^[6-15].但是,所得结果中大部分分子的振转能谱都没有被完全描述出来,而对于高激发转动态的振转数据就更难获得.近年来,随着科技的发展和计算机性能的提高,越来越多的实验技术和设备相继来研究双原子分子的振转能级,例如共振增强多光子电离光谱学技术(REMPI)^[6,7]、傅里叶转换光谱(FTS)技术^[8]、双共振光谱技术^[9]、多级激光激发光谱技

术^[10]等等.

在理论方面,1983 年 Wolniewicz^[11]用变分微扰方法研究了 H_2 , HD 和 D_2 等一系列分子的基态 $X^1\Sigma_g^+$ 的振转能级.由于该方法在研究过程中,考虑了很多近似和修正,如非绝热性、相对论以及辐射修正,因此所得到的理论数据虽然在低转动态和实验值符合得较好,但在略高的激发转动态的振转数据与实验值相比就出现了误差,从而导致了高激发转动态的振转数据的不可靠性.另外,CSE 模型在 1999 年也被用来计算 O_2 分子的一些电子态^[12,13],计算结果虽然能够很好地解释实验低转动能级和谱宽,但是它的精确度却受到仅有的实验数据的限制和影响,而且该方法忽略了很弱的转动微扰.至今,仍然有不同的理论方法相继提出以获得双原子分子精确的振转能级,例如,数值变分法^[14]、结合离散化和基矢的综合计算方法^[15]等等.然而,由于这些理论方法自身存在的局限性,因此很难得到精确的振转能级和转动常数,尤其是高激发转动态的转动信息更难获得.本文在精确研究完全振动能谱和离解能的 algebraic method(AM)方法基础上^[16,17],同样利用从实验上获得的一组精确的振转能级子集合,提出了一种新的代数方法(AM2)来精确计算稳定的双原子分子电子态的振转能级.第 2 部分详细介绍了 AM2 方法理论,第 3 部分用 AM2 方法精确计算了 HF 分子 $B^1\Sigma$ 电子态从振动量子数 $\nu = 0$ 到 $\nu = 10$

* 国家自然科学基金(批准号:10774105)和教育部科学基金资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: weiguosun@x263.net

的完全振转能级.

2. 理论与方法

对于稳定的双原子分子电子态,在非相对论条件下,运用二阶微扰理论获得了核运动的振转能级的高阶展开表达式^[16]

$$E_{vj} = E_v + \{J(j+1) - \Lambda^2\} \left[B_e - \alpha_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) + \gamma_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 - \sum_{i=3}^7 \eta_{ei} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^i \right] - \{J(j+1) - \Lambda^2\} \left[\tilde{D}_e + \beta_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \sum_{k=2}^7 \delta_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k \right] + \dots, \quad (1)$$

$$\epsilon_{vj} = B_v \{J(j+1) - \Lambda^2\} - D_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^2 + \dots, \quad (2)$$

式中 Λ 表示的是双原子分子的总电子角动量 L 的 z 轴分量 L_z 的本征值,且 $\epsilon_{vj} = E_{vj} - E_v$,因此(2)式可以扩展为以下形式:

$$\epsilon_{vj} = B_v \{J(j+1) - \Lambda^2\} - D_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^2 + H_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^3 + L_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^4 + P_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^5 + Q_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^6 + S_v \{J(j+1) - \Lambda^2\}^7 + \dots, \quad (3)$$

式中与振动相关的转动常数(VDRC)表示为

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) + \gamma_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 - \sum_{i=3}^7 \eta_{ei} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^i, \quad (4)$$

$$D_v = \tilde{D}_e + \beta_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \sum_{k=2}^7 \delta_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k, \quad (5)$$

$$H_v = h_e + \sum_{k=1}^7 h_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k, \quad (6)$$

$$L_v = l_e + \sum_{k=1}^7 l_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k, \quad (7)$$

$$P_v = p_e + \sum_{k=1}^7 p_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k, \quad (8)$$

$$Q_v = q_e + \sum_{k=1}^7 q_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k, \quad (9)$$

$$S_v = s_e + \sum_{k=1}^7 s_{ek} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^k. \quad (10)$$

将(3)式写成矩阵形式,即

$$AX_v = \epsilon_v, \quad (11)$$

式中列向量矩阵,解矩阵 X_v 和能量矩阵 ϵ_v 为

$$X_v = \begin{pmatrix} B_v \\ D_v \\ H_v \\ L_v \\ P_v \\ Q_v \\ S_v \end{pmatrix}, \quad \epsilon_v = \begin{pmatrix} \epsilon_{vj} \\ \epsilon_{v,j+k} \\ \epsilon_{v,j+l} \\ \epsilon_{v,j+m} \\ \epsilon_{v,j+q} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

系数矩阵 A 的矩阵元为 $A_{jk} = [J(j+1) - \Lambda^2]^k, k = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$. (11)式利用标准的代数方法,不用任何数学近似和物理模型,可以严格求解上述代数方程组并得到一组光谱常数.对双原子分子电子态的每一个振动带,如果可以获得一组精确的振转耦合能级 $\{\epsilon_{vj} [j, j+k, j+l, \dots, j+q]\}$,就可以严格求解上述方程组(11)式来解得该振动带内的一组转动常数 $X_v \equiv \{B_v, D_v, H_v, L_v, P_v, Q_v, S_v\}$,因此,对于不同的振动带 $\{\epsilon_{vj}\}$ 就有不同的转动常数组 X_v .

对许多双原子分子电子态的某些振动带来说,虽然通过实验方法很难得到精确的完全振转耦合能谱 $\{\epsilon_{vj}\}$,但常能获得一组精确的部分振转耦合能级子集合 $[\epsilon_{vj}]$,因此,利用代数方法可以从已知能量子集合 $[\epsilon_{vj}]$ 中的 m 个能级中一次选取 7 个能级进行计算求解,可以得到 C_m^7 组转动光谱常数,其中总有一组 X_v 对于振转耦合能谱 $\{\epsilon_{vj}\}$ 能最好地满足下列物理要求:

$$\Delta B_v \% |_{\nu} = 100 \times |B_{v, \text{imp}} - B_{v, \text{cal}}|_{\nu} / B_{v, \text{imp}} \rightarrow 0, \quad (13)$$

$$\overline{\Delta \epsilon(e, c)}_{\nu} = \frac{1}{m} \sum_j^m |\epsilon_{vj, \text{exp}} - \epsilon_{vj, \text{cal}}| \rightarrow 0, \quad (14)$$

式中 $B_{v, \text{imp}}$ 是文献中给出的实验值, $\epsilon_{vj, \text{exp}}$ 是实验得到的给定振动态下的振转耦合能级.由于精确的实验能级 $\epsilon_{vj, \text{exp}}$ 包含了所有的重要的量子效应和振转信息,而且在求解转动光谱常数 X_v 的过程中,代数方法没有利用任何的数学近似和物理模型,因此得到的 $X_v \equiv \{B_v, D_v, H_v, L_v, P_v, Q_v, S_v\}$ 是常数 VDRC 的真实物理表述,由(3)式和该组 X_v 计算得到的振转耦合能级 $\{\epsilon_{vj}\}$ 也是正确的可靠的.这样所得到的振转耦合能级 $\{\epsilon_{vj}\}$ 不仅能够重复实验上得到的振转能级 $[\epsilon_{vj}]$,而且还获得了该振动带的包含实验上未曾获得的所有高转动激发态能级的完全振转耦合能谱 $\{\epsilon_{vj}\}$.

在过去的研究工作中,曾提出代数方法(AM)来

精确求解稳定的双原子分子电子态的完全振动能谱 $\{E_{\nu}\}$ 因此将精确计算振转耦合能级 $\{\epsilon_{vj}\}$ 的代数方法称为 AM2 方法, 将计算完全振动能谱的代数方法作为 AM1 方法. 与 AM1 方法一样, AM2 也是综合运用了实验数据的精确性和理论方法上的优势. 用 AM2 获得的振转能级数据的精确性, 完全取决于部分已知实验能级 $[\epsilon_{vj}]$ 的精确度. 实验数据的误差越小, 用 AM2 方法所得到的振转能级 $\{\epsilon_{vj}\}$ 就越精确.

3. 应用与讨论

对大多数双原子分子电子态的各振动带, 无论是实验上还是理论上都很难给出包含高激发转动态振转能级的振转能谱的精确数据. AM2 方法突破了

以上局限, 该方法不使用任何数学近似和物理模型, 仅仅依靠一组包含了所有重要的量子效应和振转信息的精确的实验振转能级 $E_{vj, \text{expt}}$, 且满足一组正确的合理的物理判据, 从而保证了高转动激发态能级物理性质的正确性. 本文应用 AM2 方法研究了 HF 分子 $B^1\Sigma$ 电子态从振动量子数 $\nu = 0$ 到 $\nu = 10$ 的 11 个振动带的完全振转能级和对应的转动光谱常数. 表 1 分别列出了本文和文献给出的该电子态各振动带的转动光谱常数 $\{B_{\nu}, D_{\nu}, H_{\nu}, L_{\nu}, P_{\nu}, Q_{\nu}, S_{\nu}\}$. 表 2 给出了根据本文建议的 AM2 方法获得的包含了高激发转动态的振转能级 $\{E_{vj, \text{AM2}}\}$, 文献给出的各振动带的实验振转能级 $[E_{vj, \text{expt}}]$, 以及 AM2 和实验振转能级相比较的百分比误差 $\text{Error}_j\% = |E_{vj, \text{expt}} - E_{vj, \text{AM2}}| / E_{vj, \text{expt}} \times 100\%$.

表 1 HF 分子 $B^1\Sigma$ 电子态从 $\nu = 0$ 到 $\nu = 10$ 的各振动带的转动光谱常数

ν	B_{ν}/cm^{-1}		$D_{\nu}/10^4\text{cm}^{-1}$		$H_{\nu}/10^7\text{cm}^{-1}$		$L_{\nu}/10^{10}\text{cm}^{-1}$		$P_{\nu}/10^{13}\text{cm}^{-1}$		$Q_{\nu}/10^{16}\text{cm}^{-1}$		$S_{\nu}/10^{19}\text{cm}^{-1}$	
	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2	文献 [18]	AM2
0	4.0200	4.0169	2.020	1.7940	-0.6358		1.3485		-1.1812		0.4513		-0.0422	
1	4.0005	3.9802	2.220	0.8145	-2.3139		-0.1698		4.3074		-3.9534		1.1027	
2	3.9796	3.9378	2.425	-0.8301	-8.5291		10.4168		-5.6740		1.1664		-0.009	
3	3.9581	3.9260	2.641	-0.0196	-7.6148		10.7387		-7.1101		2.0846		-0.1802	
4	3.9355	3.8879	2.857	-0.4571	-7.2457		7.4292		-2.9063		0.0145		0.1748	
5	3.9125	3.9116	3.097	3.1379	1.6346		-4.6885		6.7831		-4.3091		1.0003	
6	3.8902	3.8706	3.354	0.5145	-13.7706		30.0252		-20.8325		-11.0732		14.5076	
7	3.8682	3.8863	3.720	6.4331	15.9761		-41.9299		60.3354		-43.9304		12.6970	
8	3.8434	3.8639	3.944	7.0677	18.5637		-49.6921		72.7385		-53.7966		15.7728	
9	3.8197	3.8204	4.238	4.3425	1.4586		-1.2516		1.0928		-0.5127		0.0812	
10	3.7962	3.8057	4.560	6.2130	11.8238		-34.3122		57.8173		-50.2477		17.6351	

由于 AM2 方法是利用部分已知的精确的实验振转能级 $[E_{vj, \text{expt}}]$ 求解方程 (11) 而没用任何数学近似和物理模型, 因此表 1 中列出的这些振动相关的转动光谱 (VDRC) 数据是正确可靠的. 与文献中给出的实验的有限的转动光谱常数比较, 振动量子数 $\nu = 0$ 到 $\nu = 10$ 的每一个振动带的 $B_{\nu, \text{AM2}}$ 都与对应的实验值 $B_{\nu, \text{exp}}$ 符合得非常好, 如在振动带 $\nu = 0$ 处, $B_{0, \text{AM2}} = 4.0169\text{cm}^{-1}$ 与实验值 $B_{0, \text{exp}} = 4.02\text{cm}^{-1}$ 仅相差 0.0031 个波数, 几乎相等. 比较结果充分满足物理要求, 即 (13) 式. 从表 1 中还可以看出当二阶转动常数 $D_{\nu, \text{AM2}}$ 与文献给出的实验值 $D_{\nu, \text{exp}}$ 作比较时, 很明显出现了较大的误差, 其原因是由于实验上给出的光谱常数往往是通过与 (2) 式相似的只包含低

阶的转动能级表达式, 利用实验中观测到的能级数据和一些数值方法拟合而得到的, 因此忽略了包含高阶的转动常数表达式, 从而给计算的光谱常数结果带来了很大误差, 如果将这些有限的低阶转动常数用来求解振转能级, 所得结果一定是错误的. 而 AM2 方法利用精确的能级表达式 (3), 获得了各振动带的包含高阶的完全振动光谱常数, 提供了精确的光谱数据.

表 2 中列出的数据可以很清楚的显示出, 对于每一个振动带, AM2 方法给出的理论振转能 $E_{vj, \text{AM2}}$ 与输入的实验振转能 $E_{vj, \text{expt}}$ 都符合得非常好, 百分误差最大量级也仅到 10^{-3} , 最大的百分误差也只有 0.003011 ($\nu = 6, J = 27$), 能级差仅 2.78 个波数, 可见计算结果已经非常满足 (14) 式所描述的物理要求.

表 2 HF 分子 $B^1\Sigma$ 电子态从 $\nu=0$ 到 $\nu=10$ 的各振动带实验、AM2 的振转能谱数据 (单位: cm^{-1})

J	$\nu=0$			$\nu=1$			$\nu=2$		
	$E_{vj}^{\text{expt}^*}$	E_{vj}^{AM2}	$E_{\text{ror}} - j\%^\triangle$	E_{vj}^{expt}	E_{vj}^{AM2}	$E_{\text{ror}} - j\%$	E_{vj}^{expt}	E_{vj}^{AM2}	$E_{\text{ror}} - j\%$
0	8.3304962×10^4	8.3305123×10^4	1.934×10^{-4}	8.4428751×10^4	8.4428770×10^4	2.250×10^{-5}	8.5518208×10^4	8.5518170×10^4	4.443×10^{-5}
1	8.3312959×10^4	8.3313157×10^4	2.373×10^{-4}	8.4436730×10^4	8.4436730×10^4	0.000	8.5526046×10^4	8.5526046×10^4	0.000
2	8.3329098×10^4	8.3329220×10^4	1.458×10^{-4}	8.4452791×10^4	8.4452648×10^4	1.693×10^{-4}	8.5542038×10^4	8.5541800×10^4	2.784×10^{-4}
3	8.3353147×10^4	8.3353303×10^4	1.867×10^{-4}	8.4476704×10^4	8.4476520×10^4	2.180×10^{-4}	8.5565845×10^4	8.5565435×10^4	4.797×10^{-4}
4	8.3385291×10^4	8.3385393×10^4	1.218×10^{-4}	8.4508704×10^4	8.4508339×10^4	4.321×10^{-4}	8.5597667×10^4	8.5596953×10^4	8.338×10^{-4}
5	8.3425355×10^4	8.3425471×10^4	1.396×10^{-4}	8.4548584×10^4	8.4548095×10^4	5.779×10^{-4}	8.5637312×10^4	8.5636358×10^4	1.114×10^{-3}
6	8.3473470×10^4	8.3473517×10^4	5.617×10^{-5}	8.4596414×10^4	8.4595776×10^4	7.541×10^{-4}	8.5684900×10^4	8.5683646×10^4	1.464×10^{-3}
7	8.3529458×10^4	8.3529502×10^4	5.210×10^{-5}	8.4652108×10^4	8.4651363×10^4	8.799×10^{-4}	8.5740296×10^4	8.5738809×10^4	1.734×10^{-3}
8	8.3593384×10^4	8.3593393×10^4	1.132×10^{-5}	8.4715663×10^4	8.4714833×10^4	9.792×10^{-4}	8.5803462×10^4	8.5801833×10^4	1.898×10^{-3}
9	8.3665156×10^4	8.3665156×10^4	0.000	8.4787048×10^4	8.4786158×10^4	1.050×10^{-3}	8.5874408×10^4	8.5872691×10^4	1.999×10^{-3}
10	8.3744749×10^4	8.3744748×10^4	1.682×10^{-6}	8.4866187×10^4	8.4865298×10^4	1.047×10^{-3}	8.5953061×10^4	8.5951345×10^4	1.997×10^{-3}
11	8.3832137×10^4	8.3832122×10^4	1.804×10^{-5}	8.4953032×10^4	8.4952210×10^4	9.673×10^{-4}	8.6039338×10^4	8.6037743×10^4	1.853×10^{-3}
12	8.3927228×10^4	8.3927228×10^4	3.500×10^{-7}	8.5047542×10^4	8.5046839×10^4	8.264×10^{-4}	8.6133215×10^4	8.6131821×10^4	1.618×10^{-3}
13	8.4030009×10^4	8.4030009×10^4	2.642×10^{-7}	8.5149627×10^4	8.5149121×10^4	5.948×10^{-4}	8.6234558×10^4	8.6233498×10^4	1.229×10^{-3}
14	8.4140406×10^4	8.4140406×10^4	0.000	8.5259281×10^4	8.5258980×10^4	3.526×10^{-4}	8.6343420×10^4	8.6342682×10^4	8.546×10^{-4}
15	8.4258338×10^4	8.4258353×10^4	1.810×10^{-5}	8.5376335×10^4	8.5376335×10^4	0.000	8.6459597×10^4	8.6459268×10^4	3.800×10^{-4}
16	8.4383756×10^4	8.4383782×10^4	3.089×10^{-5}	8.5500820×10^4	8.5501092×10^4	3.184×10^{-4}	8.6583144×10^4	8.6583144×10^4	0.000
17	8.4516553×10^4	8.4516620×10^4	7.902×10^{-5}	8.5632603×10^4	8.5633153×10^4	6.424×10^{-4}	8.6713829×10^4	8.6714190×10^4	4.159×10^{-4}
18	8.4656761×10^4	8.4656790×10^4	3.463×10^{-5}	8.5771669×10^4	8.5772414×10^4	8.682×10^{-4}	8.6851707×10^4	8.6852284×10^4	6.649×10^{-4}
19	8.4804147×10^4	8.4804215×10^4	7.974×10^{-5}	8.5917826×10^4	8.5918768×10^4	1.097×10^{-3}	8.6965666×10^4	8.6997309×10^4	8.545×10^{-4}
20	8.4958756×10^4	8.4958811×10^4	6.485×10^{-5}	8.6071100×10^4	8.6072112×10^4	1.176×10^{-3}	8.7148412×10^4	8.7149152×10^4	8.488×10^{-4}
21	8.5120465×10^4	8.5120496×10^4	3.645×10^{-5}	8.6231296×10^4	8.6232346×10^4	1.217×10^{-3}	8.7307069×10^4	8.7307708×10^4	7.321×10^{-4}
22	8.5289166×10^4	8.5289184×10^4	2.108×10^{-5}	8.6398419×10^4	8.6399376×10^4	1.107×10^{-3}	8.7472561×10^4	8.7472888×10^4	3.739×10^{-4}
23	8.5464757×10^4	8.5464788×10^4	3.632×10^{-5}	8.6572310×10^4	8.6573119×10^4	9.341×10^{-4}	8.7644615×10^4	8.7644615×10^4	0.000
24	8.5647220×10^4	8.5647220×10^4	1.422×10^{-14}	8.6752905×10^4	8.6753500×10^4	6.857×10^{-4}	8.7823262×10^4	8.7822826×10^4	4.961×10^{-4}
25	8.5836440×10^4	8.5836390×10^4	5.792×10^{-5}	8.6940101×10^4	8.6940453×10^4	4.049×10^{-4}	8.8008365×10^4	8.8007471×10^4	1.015×10^{-3}
26	8.6032226×10^4	8.6032208×10^4	2.131×10^{-5}	8.7133743×10^4	8.7133915×10^4	1.976×10^{-4}	8.8199789×10^4	8.8198507×10^4	1.454×10^{-3}
27	8.6234645×10^4	8.6234579×10^4	7.686×10^{-5}	8.7333820×10^4	8.7333820×10^4	4.185×10^{-14}	8.8397491×10^4	8.8395891×10^4	1.810×10^{-3}
28	8.6443407×10^4	8.6443407×10^4	2.819×10^{-14}	8.7540151×10^4	8.7540088×10^4	7.150×10^{-5}	8.8601302×10^4	8.8599574×10^4	1.951×10^{-3}
29	8.6658592×10^4	8.6658592×10^4	4.218×10^{-14}	8.7752689×10^4	8.7752618×10^4	8.047×10^{-5}	8.8811058×10^4	8.8809486×10^4	1.770×10^{-3}
30	8.6879963×10^4	8.6880028×10^4	7.481×10^{-5}	8.7971276×10^4	8.7971276×10^4	1.246×10^{-13}	8.9026785×10^4	8.9025530×10^4	1.409×10^{-3}
31	8.7107453×10^4	8.7107603×10^4	1.722×10^{-4}	8.8195782×10^4	8.8195893×10^4	1.254×10^{-4}	8.9248230×10^4	8.9247568×10^4	7.421×10^{-4}
32	8.7341065×10^4	8.7341198×10^4	1.522×10^{-4}	8.8426275×10^4	8.8426275×10^4	2.204×10^{-13}	8.9475412×10^4	8.9475412×10^4	2.723×10^{-14}
33	8.7580474×10^4	8.7580687×10^4	2.433×10^{-4}	8.8662058×10^4	8.8662240×10^4	2.049×10^{-4}	8.9708101×10^4	8.9708828×10^4	8.100×10^{-4}
34	8.7825940×10^4	8.7825940×10^4	2.774×10^{-14}	8.8904193×10^4	8.8903686×10^4	5.704×10^{-4}	8.9946093×10^4	8.9947538×10^4	1.606×10^{-3}
35	8.8076732×10^4	8.8076826×10^4	1.065×10^{-4}	8.9150730×10^4	8.9150730×10^4	5.330×10^{-13}	9.0190052×10^4	9.0191248×10^4	1.326×10^{-3}
36	8.8333251×10^4	8.8333222×10^4	3.281×10^{-5}	8.9403930×10^4	8.9403930×10^4	7.086×10^{-13}	9.0438126×10^4	9.0439691×10^4	1.730×10^{-3}
37	8.8596180×10^4	8.8595029×10^4	1.299×10^{-3}		8.9664639×10^4		9.0692703×10^4	9.0692703×10^4	1.343×10^{-13}
38	8.8862566×10^4	8.8862193×10^4	4.197×10^{-4}		8.9935543×10^4		9.0950341×10^4	9.0950341×10^4	1.875×10^{-13}
39	8.9136445×10^4	8.9134740×10^4	1.912×10^{-3}		9.0221441×10^4		9.1214822×10^4	9.1213049×10^4	1.944×10^{-3}
40	8.9412828×10^4	8.9412828×10^4	4.360×10^{-13}		9.0530367×10^4		9.1481898×10^4	9.1481898×10^4	3.196×10^{-13}
41		8.9696813×10^4			9.0875154×10^4			9.1758908×10^4	
42		8.9987352×10^4			9.1275569×10^4			9.2047478×10^4	
43		9.0285533×10^4			9.1761211×10^4			9.2352952×10^4	
44		9.0593051×10^4			9.2375355×10^4			9.2683340×10^4	
45		9.0912444×10^4			9.3180014×10^4			9.3050242×10^4	
46		9.1247396×10^4			9.4262526×10^4			9.3469995×10^4	
47		9.1603130×10^4			9.5744025×10^4			9.3965112×10^4	
48		9.1986906×10^4			9.7790275×10^4			9.4566041×10^4	
49		9.2408657×10^4			1.0062537×10^5			9.5313312×10^4	
50		9.2881784×10^4			1.0454896×10^5			9.6260143×10^4	

* 来自文献 18 的实验振转能级。# 用代数方法 AM2 计算得到的理论振转能级。△ 百分比误差 $E_{\text{ror}} - j\% = |E_{vj}^{\text{expt}} - E_{vj}^{\text{AM2}}| / E_{vj}^{\text{expt}} \times$

表 2(续)

<i>J</i>	$\nu = 3$			$\nu = 4$			$\nu = 5$		
	E_{ij}^{exp}	E_{ij}^{AM2}	$E_{true} - j\%$	E_{ij}^{exp}	E_{ij}^{AM2}	$E_{true} - j\%$	E_{ij}^{exp}	E_{ij}^{AM2}	$E_{true} - j\%$
0	8.6574266×10^4	8.6574290×10^4	2.772×10^{-5}	8.7598308×10^4	8.7598330×10^4	2.511×10^{-5}	8.8591408×10^4	8.8591410×10^4	2.258×10^{-6}
1	8.6582142×10^4	8.6582142×10^4	0.000	8.7606106×10^4	8.7606106×10^4	0.000	8.8599232×10^4	8.8599232×10^4	0.000
2	8.6598032×10^4	8.6597846×10^4	2.149×10^{-4}	8.7621921×10^4	8.7621659×10^4	2.991×10^{-4}	8.8614812×10^4	8.8614868×10^4	6.376×10^{-5}
3	8.6621717×10^4	8.6621401×10^4	3.648×10^{-4}	8.7645463×10^4	8.7644990×10^4	5.394×10^{-4}	8.8638333×10^4	8.8638305×10^4	3.203×10^{-5}
4	8.6653366×10^4	8.6652805×10^4	6.476×10^{-4}	8.7676931×10^4	8.7676101×10^4	9.468×10^{-4}	8.8669489×10^4	8.8669518×10^4	3.300×10^{-5}
5	8.6692789×10^4	8.6692052×10^4	8.501×10^{-4}	8.7716156×10^4	8.7714990×10^4	1.330×10^{-3}	8.8708476×10^4	8.8708480×10^4	5.013×10^{-6}
6	8.6740061×10^4	8.6739132×10^4	1.071×10^{-3}	8.7763150×10^4	8.7761652×10^4	1.707×10^{-3}	8.8755209×10^4	8.8755156×10^4	6.023×10^{-5}
7	8.6795128×10^4	8.6794029×10^4	1.267×10^{-3}	8.7817854×10^4	8.7816076×10^4	2.024×10^{-3}	8.8809569×10^4	8.8809502×10^4	7.598×10^{-5}
8	8.6857947×10^4	8.6856715×10^4	1.418×10^{-3}	8.7880247×10^4	8.7878246×10^4	2.277×10^{-3}	8.8871547×10^4	8.8871470×10^4	8.651×10^{-5}
9	8.6928447×10^4	8.6927157×10^4	1.484×10^{-3}	8.7950264×10^4	8.7948131×10^4	2.425×10^{-3}	8.8941059×10^4	8.8941007×10^4	5.857×10^{-5}
10	8.7006573×10^4	8.7005306×10^4	1.456×10^{-3}	8.8027864×10^4	8.8025693×10^4	2.466×10^{-3}	8.9018181×10^4	8.9018051×10^4	1.458×10^{-4}
11	8.7092255×10^4	8.7091103×10^4	1.322×10^{-3}	8.8112942×10^4	8.8110878×10^4	2.342×10^{-3}	8.9102599×10^4	8.9102536×10^4	7.084×10^{-5}
12	8.7185478×10^4	8.7184476×10^4	1.149×10^{-3}	8.8205477×10^4	8.8203619×10^4	2.106×10^{-3}	8.9194387×10^4	8.9194387×10^4	0.000
13	8.7286111×10^4	8.7285340×10^4	8.834×10^{-4}	8.8305350×10^4	8.8303833×10^4	1.718×10^{-3}	8.9293464×10^4	8.9293524×10^4	6.676×10^{-5}
14	8.7394106×10^4	8.7393600×10^4	5.791×10^{-4}	8.8412485×10^4	8.8411424×10^4	1.201×10^{-3}	8.9399742×10^4	8.9399857×10^4	1.291×10^{-4}
15	8.7509408×10^4	8.7509152×10^4	2.928×10^{-4}	8.8526828×10^4	8.8526280×10^4	6.194×10^{-4}	8.9513073×10^4	8.9513293×10^4	2.455×10^{-4}
16	8.7631885×10^4	8.7631885×10^4	0.000	8.8648279×10^4	8.8648279×10^4	0.000	8.9633479×10^4	8.9633727×10^4	2.763×10^{-4}
17	8.7761454×10^4	8.7761685×10^4	2.637×10^{-4}	8.8776672×10^4	8.8777290×10^4	6.958×10^{-4}	8.9760693×10^4	8.9761050×10^4	3.977×10^{-4}
18	8.7898090×10^4	8.7898439×10^4	3.970×10^{-4}	8.8912042×10^4	8.8913174×10^4	1.273×10^{-3}	8.9894784×10^4	8.9895148×10^4	4.048×10^{-4}
19	8.8041639×10^4	8.8042034×10^4	4.487×10^{-4}	8.9054201×10^4	8.9055791×10^4	1.785×10^{-3}	9.0035492×10^4	9.0035902×10^4	4.554×10^{-4}
20	8.8192043×10^4	8.8192365×10^4	3.653×10^{-4}	8.9203075×10^4	8.9205002×10^4	2.160×10^{-3}	9.0182817×10^4	9.0183193×10^4	4.164×10^{-4}
21	8.8349084×10^4	8.8349334×10^4	2.835×10^{-4}	8.9358527×10^4	8.9360673×10^4	2.401×10^{-3}	9.0336608×10^4	9.0336901×10^4	3.239×10^{-4}
22	8.8512853×10^4	8.8512853×10^4	0.000	8.9520504×10^4	8.9522680×10^4	2.430×10^{-3}	9.0496762×10^4	9.0496911×10^4	1.645×10^{-4}
23	8.8683069×10^4	8.8682840×10^4	2.579×10^{-4}	8.9688812×10^4	8.9690910×10^4	2.340×10^{-3}	9.0663114×10^4	9.0663114×10^4	1.344×10^{-4}
24	8.8859692×10^4	8.8859223×10^4	5.281×10^{-4}	8.9863408×10^4	8.9865266×10^4	2.067×10^{-3}	9.0835623×10^4	9.0835408×10^4	2.367×10^{-4}
25	8.9042658×10^4	8.9041930×10^4	8.180×10^{-4}	9.0044155×10^4	9.0045661×10^4	1.672×10^{-3}	9.1014116×10^4	9.1013698×10^4	4.589×10^{-4}
26	8.9231776×10^4	8.9230889×10^4	9.944×10^{-4}	9.0230937×10^4	9.0232023×10^4	1.203×10^{-3}	9.1198479×10^4	9.1197896×10^4	6.391×10^{-4}
27	8.9426990×10^4	8.9426019×10^4	1.086×10^{-3}	9.0423587×10^4	9.0424287×10^4	7.743×10^{-4}	9.1388616×10^4	9.1387914×10^4	7.682×10^{-4}
28	8.9628165×10^4	8.9627224×10^4	1.049×10^{-3}	9.0622110×10^4	9.0622390×10^4	3.095×10^{-4}	9.1584414×10^4	9.1583659×10^4	8.249×10^{-4}
29	8.9835148×10^4	8.9834387×10^4	8.473×10^{-4}	9.0826263×10^4	9.0826263×10^4	1.341×10^{-4}	9.1785745×10^4	9.1785022×10^4	7.881×10^{-4}
30	9.0047905×10^4	9.0047361×10^4	6.045×10^{-4}	9.1036050×10^4	9.1035819×10^4	2.541×10^{-4}	9.1992434×10^4	9.1991869×10^4	6.142×10^{-4}
31	9.0266236×10^4	9.0265972×10^4	2.927×10^{-4}	9.1251175×10^4	9.1250945×10^4	2.520×10^{-4}	9.2204253×10^4	9.2204031×10^4	2.407×10^{-4}
32	9.0490022×10^4	9.0490022×10^4	5.385×10^{-14}	9.1471618×10^4	9.1471495×10^4	1.344×10^{-4}	9.2421298×10^4	9.2421298×10^4	1.055×10^{-13}
33	9.0719303×10^4	9.0719303×10^4	8.058×10^{-14}	9.1697284×10^4	9.1697284×10^4	3.986×10^{-14}	9.2643428×10^4	9.2643428×10^4	1.315×10^{-13}
34	9.0953623×10^4	9.0953623×10^4	1.072×10^{-13}	9.1927851×10^4	9.1928095×10^4	2.650×10^{-4}	9.2870177×10^4	9.2870177×10^4	1.574×10^{-13}
35	9.1193375×10^4	9.1192851×10^4	5.745×10^{-4}	9.2163698×10^4	9.2163698×10^4	5.288×10^{-14}	9.3102107×10^4	9.3101366×10^4	7.955×10^{-4}
36	9.1437649×10^4	9.1436984×10^4	7.268×10^{-4}	9.2403897×10^4	9.2403897×10^4	6.592×10^{-14}	9.3338152×10^4	9.3337009×10^4	1.225×10^{-3}
37	9.1687659×10^4	9.1686244×10^4	1.544×10^{-3}	9.2649284×10^4	9.2648603×10^4	7.354×10^{-4}	9.3579264×10^4	9.3577521×10^4	1.862×10^{-3}
38	9.1941205×10^4	9.1941205×10^4	4.240×10^{-13}	9.2898655×10^4	9.2897958×10^4	7.504×10^{-4}	9.3824065×10^4	9.3824065×10^4	2.857×10^{-13}
39		9.2202973×10^4		9.3152524×10^4	9.3152524×10^4	7.847×10^{-14}		9.4079059×10^4	
40		9.2473407×10^4			9.3413554×10^4			9.4346940×10^4	
41		9.2755402×10^4			9.3683377×10^4			9.4635248×10^4	
42		9.3053245×10^4			9.3965927×10^4			9.4956146×10^4	
43		9.3373037×10^4			9.4267462×10^4			9.5328508×10^4	
44		9.3723203×10^4			9.4597508×10^4			9.5780744×10^4	
45		9.4115096×10^4			9.4970112×10^4			9.6354567×10^4	
46		9.4563690×10^4			9.5405442×10^4			9.7109951×10^4	
47		9.5088371×10^4			9.5931850×10^4			9.8131589×10^4	
48		9.5713832×10^4			9.6588481×10^4			9.9537215×10^4	
49		9.6471052×10^4			9.7428542×10^4			1.0148824×10^5	
50		9.7398366×10^4			9.8523386×10^4			1.0420323×10^5	

表 (续)

J	$\nu=6$			$\nu=7$			$\nu=8$		
	E_{vj}^{exp}	E_{vj}^{AM}	$E_{\text{ror}} - j\%$	E_{vj}^{exp}	E_{vj}^{AM}	$E_{\text{ror}} - j\%$	E_{vj}^{exp}	E_{vj}^{AM}	$E_{\text{ror}} - j\%$
0	8.9554393×10^4	8.9554390×10^4	3.350×10^{-6}	9.0488522×10^4	9.0488520×10^4	2.210×10^{-6}	9.1394840×10^4	9.1394840×10^4	0.000
1	8.9562131×10^4	8.9562131×10^4	0.000	9.0496290×10^4	9.0496290×10^4	0.000	9.1402565×10^4	9.1402565×10^4	0.000
2	8.9577650×10^4	8.9577612×10^4	4.297×10^{-5}	9.0511689×10^4	9.0511815×10^4	1.391×10^{-4}	9.1417843×10^4	9.1417998×10^4	1.700×10^{-4}
3	8.9601021×10^4	8.9600828×10^4	2.159×10^{-4}	9.0534899×10^4	9.0535065×10^4	1.838×10^{-4}	9.1440985×10^4	9.1441108×10^4	1.347×10^{-4}
4	8.9632028×10^4	8.9631771×10^4	2.867×10^{-4}	9.0565720×10^4	9.0566000×10^4	3.096×10^{-4}	9.1471510×10^4	9.1471849×10^4	3.711×10^{-4}
5	8.9670840×10^4	8.9670427×10^4	4.604×10^{-4}	9.0604235×10^4	9.0604569×10^4	3.690×10^{-4}	9.1509770×10^4	9.1510167×10^4	4.342×10^{-4}
6	8.9717179×10^4	8.9716772×10^4	4.538×10^{-4}	9.0650328×10^4	9.0650715×10^4	4.270×10^{-4}	9.1555513×10^4	9.1556000×10^4	5.323×10^{-4}
7	8.9771230×10^4	8.9770769×10^4	5.133×10^{-4}	9.0703967×10^4	9.0704377×10^4	4.518×10^{-4}	9.1608878×10^4	9.1609283×10^4	4.424×10^{-4}
8	8.9832789×10^4	8.9832370×10^4	4.668×10^{-4}	9.0765127×10^4	9.0765492×10^4	4.021×10^{-4}	9.1669563×10^4	9.1669950×10^4	4.222×10^{-4}
9	8.9901887×10^4	8.9901508×10^4	4.212×10^{-4}	9.0833753×10^4	9.0833997×10^4	2.690×10^{-4}	9.1737590×10^4	9.1737934×10^4	3.751×10^{-4}
10	8.9978367×10^4	8.9978106×10^4	2.902×10^{-4}	9.0909647×10^4	9.0909829×10^4	2.001×10^{-4}	9.1812962×10^4	9.1813169×10^4	2.254×10^{-4}
11	9.0062182×10^4	9.0062070×10^4	1.245×10^{-4}	9.0992829×10^4	9.0992921×10^4	1.009×10^{-4}	9.1895488×10^4	9.1895586×10^4	1.066×10^{-4}
12	9.0153298×10^4	9.0153298×10^4	0.000	9.1083203×10^4	9.1083203×10^4	0.000	9.1985112×10^4	9.1985112×10^4	0.000
13	9.0251580×10^4	9.0251683×10^4	1.136×10^{-4}	9.1180651×10^4	9.1180598×10^4	5.781×10^{-5}	9.2081746×10^4	9.2081666×10^4	8.654×10^{-5}
14	9.0356931×10^4	9.0357116×10^4	2.043×10^{-4}	9.1285116×10^4	9.1285020×10^4	1.052×10^{-4}	9.2185304×10^4	9.2185157×10^4	1.594×10^{-4}
15	9.0469312×10^4	9.0469494×10^4	2.010×10^{-4}	9.1396465×10^4	9.1396370×10^4	1.044×10^{-4}	9.2295635×10^4	9.2295479×10^4	1.685×10^{-4}
16	9.0588562×10^4	9.0588722×10^4	1.767×10^{-4}	9.1514606×10^4	9.1514536×10^4	7.639×10^{-5}	9.2412627×10^4	9.2412515×10^4	1.215×10^{-4}
17	9.0714650×10^4	9.0714714×10^4	7.029×10^{-5}	9.1639453×10^4	9.1639397×10^4	6.070×10^{-5}	9.2536200×10^4	9.2536132×10^4	7.325×10^{-5}
18	9.0847387×10^4	9.0847387×10^4	0.000	9.1770823×10^4	9.1770823×10^4	0.000	9.2666193×10^4	9.2666193×10^4	0.000
19	9.0986699×10^4	9.0986656×10^4	4.744×10^{-5}	9.1908664×10^4	9.1908679×10^4	1.661×10^{-5}	9.2802514×10^4	9.2802556×10^4	4.516×10^{-5}
20	9.1132416×10^4	9.1132416×10^4	0.000	9.2052774×10^4	9.2052835×10^4	6.615×10^{-5}	9.2945096×10^4	9.2945084×10^4	1.265×10^{-5}
21	9.1284528×10^4	9.1284528×10^4	1.335×10^{-14}	9.2203166×10^4	9.2203166×10^4	2.372×10^{-7}	9.3093654×10^4	9.3093652×10^4	2.666×10^{-6}
22	9.1442803×10^4	9.1442803×10^4	1.332×10^{-14}	9.2359560×10^4	9.2359560×10^4	0.000	9.3248144×10^4	9.3248144×10^4	1.307×10^{-14}
23	9.1607215×10^4	9.1607003×10^4	2.319×10^{-4}	9.2521968×10^4	9.2521912×10^4	6.081×10^{-5}	9.3408534×10^4	9.3408458×10^4	8.177×10^{-5}
24	9.1777571×10^4	9.1776871×10^4	7.625×10^{-4}	9.2690178×10^4	9.2690118×10^4	6.470×10^{-5}	9.3574535×10^4	9.3574488×10^4	5.068×10^{-5}
25	9.1953786×10^4	9.1952232×10^4	1.690×10^{-3}	9.2864063×10^4	9.2864063×10^4	1.312×10^{-14}	9.3746111×10^4	9.3746111×10^4	2.599×10^{-14}
26	9.2135727×10^4	9.2133192×10^4	2.752×10^{-3}	9.3043559×10^4	9.3043602×10^4	4.585×10^{-5}	9.3923057×10^4	9.3923167×10^4	1.173×10^{-4}
27	9.2323301×10^4	9.2320521×10^4	3.011×10^{-3}	9.3228460×10^4	9.3228549×10^4	9.526×10^{-5}	9.4105214×10^4	9.4105446×10^4	2.468×10^{-4}
28	9.2516311×10^4	9.2516311×10^4	2.239×10^{-13}	9.3418690×10^4	9.3418690×10^4	6.521×10^{-14}	9.4292709×10^4	9.4292709×10^4	9.044×10^{-14}
29		9.2725028×10^4		9.3614053×10^4	9.3613844×10^4	2.232×10^{-4}	9.4485089×10^4	9.4484775×10^4	3.322×10^{-4}
30		9.2955162×10^4		9.3814418×10^4	9.3814025×10^4	4.194×10^{-4}	9.4682366×10^4	9.4681741×10^4	6.599×10^{-4}
31		9.3221702×10^4		9.4019772×10^4	9.4019772×10^4	1.814×10^{-13}	9.4884421×10^4	9.4884421×10^4	2.440×10^{-13}
32		9.3549761×10^4			9.4232765×10^4			9.5095144×10^4	
33		9.3979766×10^4			9.4456858×10^4			9.5319103×10^4	
34		9.4574761×10^4			9.4699762×10^4			9.5566522×10^4	
35		9.5430491×10^4			9.4975650×10^4			9.5855998×10^4	
36		9.6689148×10^4			9.5309066×10^4			9.6219507×10^4	
37		9.8557861×10^4			9.5740653×10^4			9.6709707×10^4	
38		1.0133327×10^5			9.6335334×10^4			9.7410350×10^4	
39		1.0543384×10^5			9.7193801×10^4			9.8450870×10^4	
40		1.1144200×10^5			9.8468359×10^4			1.0002647×10^5	
41		1.2015847×10^5			1.0038446×10^5			1.0242536×10^5	
42		1.3267195×10^5			1.0326961×10^5			1.0606532×10^5	
43		1.5044761×10^5			1.0759162×10^5			1.1154199×10^5	
44		1.7543880×10^5			1.1400888×10^5			1.1969221×10^5	
45		2.1022713×10^5			1.2343547×10^5			1.3167616×10^5	
46		2.5819704×10^5			1.3712509×10^5			1.4908291×10^5	
47		3.2375203×10^5			1.5677806×10^5			1.7406505×10^5	
48		4.1258114×10^5			1.8467677×10^5			2.0950900×10^5	
49		5.3198557×10^5			2.2385605×10^5			2.5924894×10^5	
50		6.9127719×10^5			2.7831580×10^5			3.2833383×10^5	

表 2 (续)

J	$\nu = 9$			$\nu = 10$		
	E_{ij}^{exp1}	E_{ij}^{AM2}	$E_{\text{ror}} - j\%$	E_{ij}^{exp1}	E_{ij}^{AM2}	$E_{\text{ror}} - j\%$
0	9.2274147×10^4	9.2274150×10^4	3.251×10^{-6}	9.3127443×10^4	9.3127440×10^4	3.221×10^{-6}
1	9.2281789×10^4	9.2281789×10^4	0.000	9.3135049×10^4	9.3135049×10^4	0.000
2	9.2297048×10^4	9.2297057×10^4	9.324×10^{-6}	9.3150126×10^4	9.3150252×10^4	1.356×10^{-4}
3	9.2319887×10^4	9.2319932×10^4	4.889×10^{-5}	9.3172994×10^4	9.3173021×10^4	2.937×10^{-5}
4	9.2350386×10^4	9.2350385×10^4	1.292×10^{-6}	9.3203132×10^4	9.3203315×10^4	1.965×10^{-4}
5	9.2388386×10^4	9.2388374×10^4	1.293×10^{-5}	9.3240977×10^4	9.3241082×10^4	1.129×10^{-4}
6	9.2433832×10^4	9.2433850×10^4	1.934×10^{-5}	9.3286065×10^4	9.3286263×10^4	2.119×10^{-4}
7	9.2486748×10^4	9.2486753×10^4	5.678×10^{-6}	9.3338589×10^4	9.3338790×10^4	2.152×10^{-4}
8	9.2546967×10^4	9.2547017×10^4	5.364×10^{-5}	9.3398492×10^4	9.3398592×10^4	1.070×10^{-4}
9	9.2614588×10^4	9.2614564×10^4	2.542×10^{-5}	9.3465540×10^4	9.3465592×10^4	5.595×10^{-5}
10	9.2689322×10^4	9.2689314×10^4	9.085×10^{-6}	9.3539639×10^4	9.3539709×10^4	7.527×10^{-5}
11	9.2771163×10^4	9.2771174×10^4	1.169×10^{-5}	9.3620856×10^4	9.3620856×10^4	0.000
12	9.2860065×10^4	9.2860049×10^4	1.769×10^{-5}	9.3709026×10^4	9.3708938×10^4	9.430×10^{-5}
13	9.2955835×10^4	9.2955835×10^4	0.000	9.3803922×10^4	9.3803851×10^4	7.530×10^{-5}
14	9.3058422×10^4	9.3058425×10^4	2.981×10^{-6}	9.3905518×10^4	9.3905485×10^4	3.535×10^{-5}
15	9.3167689×10^4	9.3167704×10^4	1.654×10^{-5}	9.4013716×10^4	9.4013716×10^4	0.000
16	9.3283618×10^4	9.3283556×10^4	6.672×10^{-5}	9.4128409×10^4	9.4128415×10^4	5.913×10^{-6}
17	9.3405917×10^4	9.3405857×10^4	6.476×10^{-5}	9.4249393×10^4	9.4249444×10^4	5.412×10^{-5}
18	9.3534453×10^4	9.3534481×10^4	2.960×10^{-5}	9.4376665×10^4	9.4376665×10^4	1.291×10^{-14}
19	9.3669329×10^4	9.3669299×10^4	3.175×10^{-5}	9.4509879×10^4	9.4509939×10^4	6.339×10^{-5}
20	9.3810180×10^4	9.3810181×10^4	8.223×10^{-7}	9.4649175×10^4	9.4649130×10^4	4.713×10^{-5}
21	9.3956992×10^4	9.3956992×10^4	1.297×10^{-14}	9.4794122×10^4	9.4794108×10^4	1.475×10^{-5}
22	9.4109542×10^4	9.4109599×10^4	6.022×10^{-5}	9.4944742×10^4	9.4944742×10^4	3.850×10^{-14}
23	9.4267880×10^4	9.4267866×10^4	1.471×10^{-5}	9.5100897×10^4	9.5100900×10^4	2.708×10^{-6}
24	9.4431670×10^4	9.4431660×10^4	1.071×10^{-5}	9.5262441×10^4	9.5262441×10^4	7.674×10^{-14}
25	9.4600846×10^4	9.4600846×10^4	7.727×10^{-14}	9.5429161×10^4	9.5429224×10^4	6.599×10^{-5}
26	9.4775291×10^4	9.4775291×10^4	1.157×10^{-13}	9.5601183×10^4	9.5601132×10^4	5.370×10^{-5}
27	9.4954909×10^4	9.4954861×10^4	5.019×10^{-5}	9.5778151×10^4	9.5778151×10^4	2.035×10^{-13}
28	9.5139422×10^4	9.5139422×10^4	2.305×10^{-13}		9.5960545×10^4	
29	9.5328804×10^4	9.5328834×10^4	3.148×10^{-5}		9.6149184×10^4	
30	9.5522901×10^4	9.5522951×10^4	5.200×10^{-5}		9.6346143×10^4	
31	9.5721612×10^4	9.5721612×10^4	6.237×10^{-13}		9.6555691×10^4	
32		9.5924637×10^4			9.6785900×10^4	
33		9.6131815×10^4			9.7051121×10^4	
34		9.6342893×10^4			9.7375719×10^4	
35		9.6557558×10^4			9.7799555×10^4	
36		9.6775428×10^4			9.8385854×10^4	
37		9.6996024×10^4			9.9232314×10^4	
38		9.7218759×10^4			1.0048650×10^5	
39		9.7442915×10^4			1.0236689×10^5	
40		9.7667630×10^4			1.0519128×10^5	
41		9.7891890×10^4			1.0941463×10^5	
42		9.8114530×10^4			1.1567898×10^5	
43		9.8334256×10^4			1.2487860×10^5	
44		9.8549691×10^4			1.3824433×10^5	
45		9.8759456×10^4			1.5745172×10^5	
46		9.8962301×10^4			1.8475865×10^5	
47		9.9157303×10^4			2.2317932×10^5	
48		9.9344149×10^4			2.7670250×10^5	
49		9.9523531×10^4			3.5056367×10^5	
50		9.9697686×10^4			4.5158247×10^5	

从表 2 中还可以看到,每一个振动带内都选出了 7 个振转能级(以黑体表示),实际上这 7 个转动态数据即几乎包含了该振动带所有的重要的量子效应和振转信息,由这 7 个最能体现出该振动带的物理机理的能级组合,解得一组最好的转动光谱常数 $\{B_v, D_v, H_v, L_v, P_v, Q_v, S_v\}$,又由于 AM2 方法没使用任何数学近似和物理模型,因此用最好的一组转动光谱常数获得的理论振转能级不但很好地重复了已知输入的实验能级,而且还给出了高阶(包含 $J = 50$ 在

内)的振转能级结果,由于以上讨论的理论结果均很好的满足物理判据(13)(14)式,因此 AM2 方法预测的高阶振转能级是精确可靠的。

为了更直接的描述 AM2 方法的优越性,图 1 将各振动带的 AM2 振转能级(以虚线表示)与实验能级(以实线表示)作了更直观的比较,从图 1 中再一次清晰地看到,用 AM2 方法得到的 $E_{vj,AM2}$ 与 $E_{vj,expt}$ 不但几乎能完全符合,而且给出了实验上很难得到的高阶转动激发态的数据。

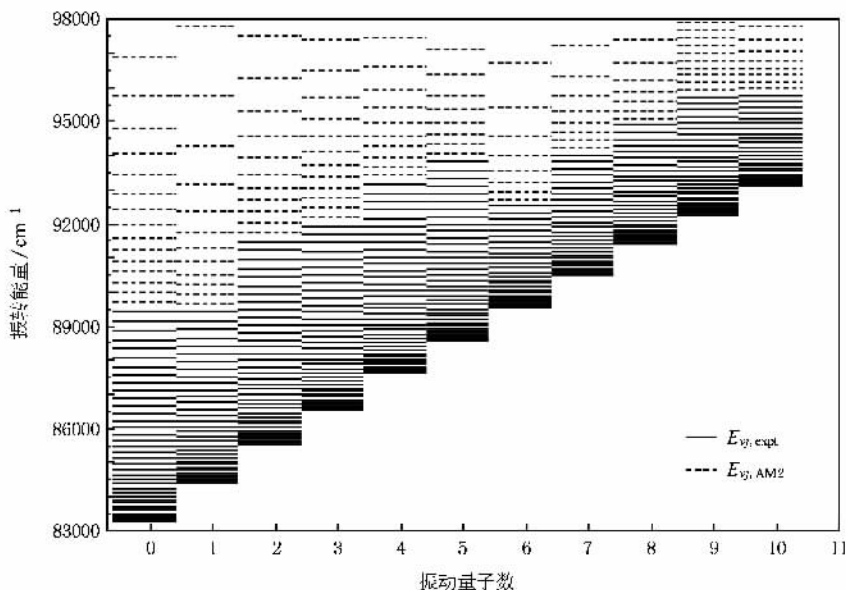


图 1 各振动带的实验振转能级 $E_{vj,expt}$ 与 AM2 振转能级 $E_{vj,AM2}$ 的比较

4. 结 论

对很多双原子分子电子态的振转能级而言,虽然已经有了一些研究结果,但其高振转激发能级还很缺乏.由于处于高振转激发态的分子运动太快且不稳定,不仅从实验上很难获得这部分振转能级的精确数值,用现代量子理论和模型得到这些重要的物理机理往往也非常困难,而且文献上已发表的大部分少量的转动光谱常数也不能产生正确的高激发振转能级.本文基于代数方法(AM)可以获得双原子分子的包含最高振动能级在内的所有高阶振动能级的精确数值这一事实,提出了一种新的理论方法 AM2,以获得高振转激发能级的精确数据.与 AM 方法一样,AM2 方法只需要部分精确的已知实验振转

能级,不使用任何数学近似和物理模型,通过严格求解正确描述转动能级物理规律的代数方程并使用一组正确的物理判据,便可获得双原子分子电子体系各振动带的精确的转动光谱常数,从而获得精确的振转能谱.这些振转能谱不仅正确地重复了相应振动带的已知实验能级,更重要的是获得了无论是实验上还是理论上都难以得到的包含高阶的转动激发态在内的振转能谱数据.本文应用新理论方法 AM2 计算了 HF 分子 $B^1\Sigma$ 电子态从振动量子数 $v = 0$ 到 $v = 10$ 的振转能级,获得了非常满意的结果,理论振转能级与实验能级符合得非常好,相对误差小到万分之几甚至千万分之几.这说明 AM2 方法对研究双原子分子的振转能级结构是非常有效的、简单经济的,为实验技术难以精确测量的双原子分子体系在理论上提供了获得精确分子振转能谱的物理新方法.

- [1] Herzberg G 1953 *Molecular Spectra and Molecular Structure* Volume I (New York : Van Nostrand Reinhold)
- [2] Wynar R , Freeland R S , Han D J , Ryu C , Heinzen D J 2000 *Science* **287** 1016
- [3] Xiao B , Kado S , Kajita S , Yamasaki D 2004 *Plasma Phys. Control. Fusion* **46** 653
- [4] Puzzarini C , Lara-Castells M P , Tarroni R , Palmieri P , Domaison J 1999 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1** 3955
- [5] Mladenovic M 2002 *Spectro. chimica Acta Part A* **58** 809
- [6] Yokelson R J , Lipert R J , Chupka W A 1992 *J. Chem. Phys.* **97** 6144
- [7] Sur A , Ramana C V , Chupka W A , Colson S D 1986 *J. Chem. Phys.* **84** 69
- [8] Staunum P , Pashov A , Knöckel H , Tiemann E 2007 *Phys. Rev. A* **75** 042513
- [9] Ekey R C , Jr , Marks A , McCormack E F 2006 *Phys. Rev. A* **73** 023412
- [10] Reinhold E , Hogervorst W , Ubachs W 1999 *Phys. Rev. A* **60** 1258
- [11] Wolniewicz L 1983 *J. Chem. Phys.* **78** 6173
- [12] Morrill J S , Ginter M L , Gibson S T , Lewis B R 1999 *J. Chem. Phys.* **111** 173
- [13] Lewis B R , Gibson S T , Morrill J S , Ginter M L 1999 *J. Chem. Phys.* **111** 186
- [14] Letelier J R , Senent M L 2006 *Spectro. Chimica Acta Part A* **65** 1030
- [15] González-Férez R , Schmelcher P 2004 *Phys. Rev. A* **69** 023402
- [16] Sun W , Hou S , Feng H , Ren W 2002 *J. Mol. Spectros.* **215** 93
- [17] Sun W , Ren W , Hou S , Feng H 2005 *Mol. Phys.* **103** 2335
- [18] Di Lonardo G , Douglas A E 1973 *Can. J. Phys.* **51** 434

Accurate studies on rovibrational energies of the electronic state $B^1\Sigma$ of HF molecule using an algebraic approach^{*}

Fan Qun-Chao Sun Wei-Guo[†] Qu Shuang-Shuang

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

(Received 29 September 2007 ; revised manuscript received 4 December 2007)

Abstract

Based on the algebraic method (AM) presented in our previous study , a new algebraic approach (AM2) is suggested to evaluate accurate rovibrational energies and corresponding rotational constants using known experimental data of rovibrational energies of limited accuracy of a given rovibrational band for a diatomic electronic state. The results of research on rovibrational energies of the $B^1\Sigma$ electronic state of HF molecule shows that Algebraic Method 2 gives rovibrational energies in excellent agreement with experimental data , and the method generates reliable energies of high-lying rovibrational excited states which may be difficult to obtain experimentally or theoretically.

Keywords : algebraic method , diatomic molecular , rovibrational energy

PACC : 3310 , 3520P

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774105) and by the Science Foundation of State Education Ministry.

[†] Corresponding author. E-mail : weiguosun@x263.net