

VO 分子 ${}^2\Delta_{3/2}$ — $1^2\Delta_{3/2}$ 电子跃迁 P 线系 发射谱线的研究*

刘渭宁¹⁾ 樊群超^{2)†} 孙卫国^{2)3)‡} 冯灏²⁾ 胡石¹⁾

1) (西华大学材料科学与工程学院, 西华大学先进计算研究中心, 成都 610039)

2) (西华大学物理与化学学院, 西华大学先进计算研究中心, 成都 610039)

3) (四川大学原子和分子物理研究所, 成都 610065)

(2011 年 12 月 21 日收到; 2012 年 2 月 16 日收到修改稿)

本文利用孙卫国课题组建立的能精确计算(预言)某双原子分子电子态 P 线系发射谱线的物理新公式, 首次研究了 VO 分子从电子态 ${}^2\Delta_{3/2}$ 跃迁到电子态 $1^2\Delta_{3/2}$ 的 (0, 0) 跃迁带中的 P 线系发射谱线. 获得的研究结果不仅重复了实验上已知的低转动态谱线数据, 而且还正确预言了该跃迁带在实验上难以精确测量的转动量子数 $J = 80.5$ 以内的高振转激发态的 P 线系发射光谱. 为研究 VO 分子内部结构提供了重要的物理信息.

关键词: 双原子分子, VO, 跃迁谱线

PACS: 33.15.Mt, 34.50.Ez, 33.20.Sn, 33.20.Wr

1 引言

对于原子分子物理、激光光谱学和分析测量科学等学科而言, 研究分子的跃迁谱线是一个重要的领域. 为了更好地反映分子内部的重要信息, 需要获得更为精确的跃迁谱线数据尤其是高振转激发态的谱线数据^[1-4]. 在天体物理、等离子体物理等尖端学科领域中, 精确的谱线数据尤为重要^[5]. 近期人们一直关注的 VO 体系, 实验上目前获得的谱线数据为转动量子数 $J = 47.5$ 以内的部分数据^[6-10], 使人们不能充分了解 VO 分子的内部结构.

钒的化学性质十分稳定, 在 300 °C 的高温下没有明显的氧化现象. 纯度很高的钒可拉成细丝或压成钒箔. 然而钒中掺入氧等杂质时, 便变得很脆, 易碎, 可见氧的加入会使钒的性质产生巨大的变化. 另一方面, 钒氧化物在核工业、锂电池、丙烯催化剂等多方面也得到了应用和研究, 已成为化学工业

中最佳催化剂之一, 有“化学面包”之称. 另外, 在一些褐矮星的大气层中也发现了 VO, 事实上, VO 光谱正是 M 型矮星的分类基础^[6], 这对于研究星体的形成提供了参考依据. 因此充分了解 VO 分子结构是具有科学和现实意义的, 而光谱正是反映分子结构的重要手段. 本文对 VO 分子从 ${}^2\Delta_{3/2}$ 态到 $1^2\Delta_{3/2}$ 态中 (0, 0) 跃迁带的 P 线系发射谱线进行研究, 丰富了 VO 分子的光谱信息, 为需要 VO 分子精确跃迁谱线的研究工作提供数据支撑.

2 理论与方法

对于某双原子体系, 由于实验设备精度、方法等自身的局限, 现代实验技术往往难以获得体系的高振转激发态的精确跃迁谱线. 但总可以获得部分精确的较低能级跃迁谱线子集合 $[\nu_J]$ 和这些体系各振动态的分子常数 D_v 的正确数据. 根据这些事实, 孙卫国课题组运用多次微分的思想, 结合经典

* 国家自然科学基金(批准号: 11074204), 四川省科技厅青年基金(批准号* 2012JQ0055) 和省教育厅重点(批准号: 12ZA165) 资助的课题.

† E-mail: fanqunchao@mail.xhu.edu.cn

‡ E-mail: swg@mail.xhu.edu.cn

的双原子分子跃迁谱线表达式,建立了精确计算双原子分子 P 线系跃迁谱线的物理新公式 [11,12]

$$\begin{aligned} \nu_{J_{16}} = & (\nu_{J_{15}} + \nu_{J_{14}} - \nu_{J_{13}}) \\ & + (\nu_{J_{12}} - \nu_{J_{11}} - \nu_{J_{10}} + \nu_{J_9}) \frac{S_5}{S_6} \\ & + (\nu_{J_8} - \nu_{J_7} - \nu_{J_6} + \nu_{J_5}) \frac{S_2}{S_6} \\ & - (\nu_{J_4} - \nu_{J_3} - \nu_{J_2} + \nu_{J_1}) \frac{S_1}{S_6} \\ & + D_{v'} \left(\frac{S_3}{S_6} - \frac{S_7}{S_6} \right) \\ & + D_{v''} \left(\frac{S_8}{S_6} - \frac{S_4}{S_6} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

式中, $(\nu_{J_1} \cdots \nu_{J_{15}})$ 为从已知实验数据中筛选的最好表征某体系跃迁带真实物理信息的 15 条谱线数据, ν_{16} 为对应转动量子态 J_{16} 的未知谱线数据, 函数 $(S_1 \cdots S_8)$ 只与转动量子数 $(J_1 \cdots J_{15})$ 有关, $(D_{v'}, D_{v''})$ 为体系某跃迁带对应的上下振动态的离心畸变转动常数. 从 (1) 式可以看出, 对于某双原子分子电子跃迁的 P 线系跃迁带, 只要获知 15 条精确的跃迁谱线以及较高振动态和较低振动态对应的离心畸变常数 $D_{v'}$ 和 $D_{v''}$ 的正确数据, 在确保展开系数 $(S_1 \cdots S_8)$ 不为零的前提下, 就可以计算出精确的未知跃迁谱线 ν_{16} , 并且计算结果只随转动量子数 J_{16} 的取值不同而不同.

若已知某双原子分子电子态的 $m(m \geq 15)$ 条跃迁谱线的实验数据, 便可从 m 条已知谱线中筛选出一组 15 条跃迁谱线构成一个谱线子集合, 共有 $N = C_m^{15}$ 种选法, 然后求解方程 (1) N 次. 其中总有一组跃迁谱线子集合能最好地满足以下判据 [11,12]:

$$|\nu_{J,\text{exp}t} - \nu_{J,\text{cal}}| \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$|\Delta_{J,\text{exp}t} - \Delta_{J,\text{cal}}| \rightarrow 0, \Delta_J = \nu_{J-1} - \nu_J, \quad (3)$$

$$|\Delta_{J,\text{exp}t}/\nu_{J-1,\text{exp}t} - |\Delta_{J,\text{cal}}/\nu_{J-1,\text{cal}}| \rightarrow 0. \quad (4)$$

那么这组跃迁谱线数据就是该分子体系真实跃迁谱线集合的一组最佳物理表象. 在推导方程 (1) 的过程中, 没有使用任何数学模型和新的物理近似. 通过反复求解方程 (1), 寻找满足物理判据 (2)—(4) 式的跃迁谱线的最佳子集合 $[v_J]$, 从而获得该双原子分子特定电子跃迁的高振转激发跃迁信息的谱线集合. 需要说明的是, 通过这种方法求出来的新的谱线集合的精确度几乎唯一地由所选 15 条实验谱线的精确度决定, 即实验谱线的误差越小, 所产

生的新谱线的误差就越小.

3 应用与讨论

本文利用 (1) 式首次研究了 VO 分子在 ${}^2\Delta_{3/2}$ — ${}^1\Delta_{3/2}$ 跃迁体系中 (0, 0) 跃迁带的 P 支发射光谱, 获得了很好的理论结果. 表 1 中列出了实验上获得的离心畸变常数 $(D_{v'}, D_{v''})$ 的值, 以及通过计算后得到的能最好地表征各跃迁带谱线集合的真实物理信息的 15 条发射谱线所对应的转动量子数 $(J_1 \cdots J_{15})$. 通过表 1 可以看出, 在利用 (1) 式进行计算时, 对 15 条发射谱线的选取是无规律的, $(J_1 \cdots J_{15})$ 的选取只是为了使最终计算结果能最好地满足 (2)—(4) 式的物理判据.

表 1 VO 分子 ${}^2\Delta_{3/2}$ — ${}^1\Delta_{3/2}$ 电子态跃迁 (0, 0) 跃迁带的转动常数 D_v (cm^{-1}) 以及选取利用 (1) 式计算的 15 条 P 支实验谱线

对应的转动量子数	
物理量	数值
D_v	6.38×10^{-7} ($v = 0$)
	6.85×10^{-7} ($v = 0$)
J_1	8.5
J_2	10.5
J_3	11.5
J_4	12.5
J_5	14.5
J_6	16.5
J_7	17.5
J_8	20.5
J_9	21.5
J_{10}	28.5
J_{11}	32.5
J_{12}	33.5
J_{13}	34.5
J_{14}	36.5
J_{15}	40.5

注: 光谱常数 D_v 的取值来自文献 [9].

表 2 分别列出了文献 [9] 中 VO 分子在 ${}^2\Delta_{3/2}$ — ${}^1\Delta_{3/2}$ 体系 (0,0) 振转跃迁带的 P 支发射光谱的实验数据, 和利用 (1) 式计算得到的包含高振转激发态 $J = 80.5$ 在内的发射光谱线的理论数据, 以及实验与理论结果的绝对误差 $(\nu_{J,\text{exp}t} - \nu_{J,\text{cal}})$ 、谱线的一次逐差 $(\Delta_J = \nu_{J-1} - \nu_J)$ 、逐差与谱线

之比 ($\text{Rate}_J = \Delta_J/\nu_{J-1}$)、逐差与谱线比之差 ($\Delta\text{Rate}_J = \text{Rate}_{J,\text{exp } t} - \text{Rate}_{J,\text{cal}}$). 计算使用的 15 条已知实验谱线数据已用黑体标出, 它们

分别对应于表 1 中列出的 15 个转动量子数. 此表中除 Rate_J , ΔRate_J 外的所有数据均以波数为单位.

表 2 VO 分子 ${}^2\Delta_{3/2}-1^2\Delta_{3/2}$ 电子态跃迁 (0, 0) 跃迁带 P 支跃迁谱线的实验与理论数据比较
(除 $\text{Rate}_{J,\text{exp } t}$, $\text{Rate}_{J,\text{cal}}$, ΔRate_J 外, 单位为 cm^{-1})

J	$V_{J,\text{exp}}$	$V_{J,\text{cal}}$	$\text{exp } t. - \text{cal.}$	$\Delta_{J,\text{exp } t}$	$\Delta_{J,\text{cal}}$	$\text{Rate}_{J,\text{exp } t}$	$\text{Rate}_{J,\text{cal}}$	ΔRate_J
0.5		22037.2765						
1.5		22036.1159			1.1606		5.2665×10^{-5}	
2.5		22034.8404			1.2755		5.7882×10^{-5}	
3.5		22033.4502			1.3902		6.3091×10^{-5}	
4.5		22031.9453			1.5049		6.8301×10^{-5}	
5.5		22030.3257			1.6196		7.3511×10^{-5}	
6.5		22028.5914			1.7343		7.8723×10^{-5}	
7.5		22026.7424			1.8490		8.3936×10^{-5}	
8.5	22024.7800	22024.7788	0.0012		1.9636		8.9146×10^{-5}	
9.5	22022.6970	22022.7005	-0.0035	2.0830	2.0783	9.4575×10^{-5}	9.4362×10^{-5}	2.1339×10^{-7}
10.5	22020.5160	22020.5077	0.0083	2.1810	2.1928	9.9034×10^{-5}	9.9570×10^{-5}	-5.3580×10^{-7}
11.5	22018.2050	22018.2003	0.0047	2.3110	2.3074	1.0495×10^{-4}	1.0478×10^{-4}	1.6344×10^{-7}
12.5	22015.7840	22015.7784	0.0056	2.4210	2.4219	1.0995×10^{-4}	1.1000×10^{-4}	-4.0899×10^{-8}
13.5	22013.2230	22013.2419	-0.0189	2.5610	2.5365	1.1633×10^{-4}	1.1521×10^{-4}	1.1128×10^{-6}
14.5	22010.5860	22010.5910	-0.0050	2.6370	2.6509	1.1979×10^{-4}	1.2042×10^{-4}	-6.3134×10^{-7}
15.5	22007.8410	22007.8257	0.0153	2.7450	2.7653	1.2471×10^{-4}	1.2563×10^{-4}	-9.2225×10^{-7}
16.5	22004.9500	22004.9459	0.0041	2.8910	2.8798	1.3136×10^{-4}	1.3085×10^{-4}	5.0882×10^{-7}
17.5	22001.9510	22001.9517	-0.0007	2.9990	2.9942	1.3629×10^{-4}	1.3607×10^{-4}	2.1811×10^{-7}
18.5	21998.8370	21998.8433	-0.0063	3.1140	3.1084	1.4153×10^{-4}	1.4128×10^{-4}	2.5453×10^{-7}
19.5		21995.6205			3.2228		1.4650×10^{-4}	
20.5	21992.2980	21992.2834	0.0146		3.3371		1.5172×10^{-4}	
21.5	21988.8300	21988.8321	-0.0021	3.4680	3.4513	1.5769×10^{-4}	1.5693×10^{-4}	7.5925×10^{-7}
22.5	21985.2660	21985.2666	-0.0006	3.5640	3.5655	1.6208×10^{-4}	1.6215×10^{-4}	-6.8201×10^{-8}
23.5	21981.5610	21981.5870	-0.0260	3.7050	3.6796	1.6852×10^{-4}	1.6737×10^{-4}	1.1553×10^{-6}
24.5		21977.7932			3.7938		1.7259×10^{-4}	
25.5		21973.8854			3.9078		1.7781×10^{-4}	
26.5	21969.7970	21969.8636	-0.0666		4.0218		1.8303×10^{-4}	
27.5		21965.7278			4.1358		1.8825×10^{-4}	
28.5	21961.5280	21961.4781	0.0499		4.2497		1.9347×10^{-4}	
29.5		21957.1144			4.3637		1.9870×10^{-4}	
30.5	21952.6400	21952.6370	0.0030		4.4774		2.0392×10^{-4}	
31.5	21948.0460	21948.0457	0.0003	4.5940	4.5913	2.0927×10^{-4}	2.0915×10^{-4}	1.2296×10^{-7}
32.5	21943.3480	21943.3408	0.0072	4.6980	4.7049	2.1405×10^{-4}	2.1437×10^{-4}	-3.1438×10^{-7}
33.5	21938.5230	21938.5221	0.0009	4.8250	4.8187	2.1988×10^{-4}	2.1960×10^{-4}	2.8703×10^{-7}
34.5	21933.5480	21933.5898	-0.0418	4.9750	4.9323	2.2677×10^{-4}	2.2482×10^{-4}	1.9463×10^{-6}
35.5	21928.5670	21928.5440	0.0230	4.9810	5.0458	2.2710×10^{-4}	2.3005×10^{-4}	-2.9539×10^{-6}
36.5	21923.4070	21923.3846	0.0224	5.1600	5.1594	2.3531×10^{-4}	2.3528×10^{-4}	2.7115×10^{-8}
37.5	21918.1150	21918.1118	0.0032	5.2920	5.2728	2.4139×10^{-4}	2.4051×10^{-4}	8.7553×10^{-7}

表 1 (续)

J	$V_{J,\text{exp}}$	$V_{J,\text{cal}}$	$\text{exp } t. - \text{cal.}$	$\Delta_{J,\text{exp } t}$	$\Delta_{J,\text{cal}}$	$\text{Rate}_{J,\text{exp } t}$	$\text{Rate}_{J,\text{cal}}$	ΔRate_J
38.5	21912.7250	21912.7255	-0.0005	5.3900	5.3863	2.4592×10^{-4}	2.4575×10^{-4}	1.6877×10^{-7}
39.5	21907.2000	21907.2260	-0.0260	5.5250	5.4995	2.5214×10^{-4}	2.5097×10^{-4}	1.1637×10^{-6}
40.5	21901.5990	21901.6131	-0.0141	5.6010	5.6129	2.5567×10^{-4}	2.5621×10^{-4}	-5.4290×10^{-7}
41.5	21895.8960	21895.8870	0.0090	5.7030	5.7261	2.6039×10^{-4}	2.6145×10^{-4}	-1.0545×10^{-6}
42.5	21890.0530	21890.0477	0.0053	5.8430	5.8393	2.6685×10^{-4}	2.6668×10^{-4}	1.6887×10^{-7}
43.5	21884.1010	21884.0954	0.0056	5.9520	5.9523	2.7190×10^{-4}	2.7192×10^{-4}	-1.3771×10^{-8}
44.5	21878.0350	21878.0300	0.0050	6.0660	6.0654	2.7719×10^{-4}	2.7716×10^{-4}	2.7346×10^{-8}
45.5	21871.8490	21871.8516	-0.0026	6.1860	6.1784	2.8275×10^{-4}	2.8240×10^{-4}	3.4732×10^{-7}
46.5	21865.5450	21865.5604	-0.0154	6.3040	6.2912	2.8822×10^{-4}	2.8764×10^{-4}	5.8526×10^{-7}
47.5		21859.1563			6.4041		2.9289×10^{-4}	
48.5		21852.6394			6.5169		2.9813×10^{-4}	
49.5		21846.0098			6.6296		3.0338×10^{-4}	
50.5		21839.2677			6.7421		3.0862×10^{-4}	
51.5		21832.4129			6.8548		3.1387×10^{-4}	
52.5		21825.4457			6.9672		3.1912×10^{-4}	
53.5		21818.3661			7.0796		3.2437×10^{-4}	
54.5		21811.1741			7.1920		3.2963×10^{-4}	
55.5		21803.8699			7.3042		3.3488×10^{-4}	
56.5		21796.4535			7.4164		3.4014×10^{-4}	
57.5		21788.9251			7.5284		3.4540×10^{-4}	
58.5		21781.2846			7.6405		3.5066×10^{-4}	
59.5		21773.5321			7.7525		3.5592×10^{-4}	
60.5		21765.6679			7.8642		3.6118×10^{-4}	
61.5		21757.6918			7.9761		3.6645×10^{-4}	
62.5		21749.6041			8.0877		3.7172×10^{-4}	
63.5		21741.4048			8.1993		3.7699×10^{-4}	
64.5		21733.0939			8.3109		3.8226×10^{-4}	
65.5		21724.6717			8.4222		3.8753×10^{-4}	
66.5		21716.1381			8.5336		3.9281×10^{-4}	
67.5		21707.4932			8.6449		3.9809×10^{-4}	
68.5		21698.7373			8.7559		4.0336×10^{-4}	
69.5		21689.8702			8.8671		4.0865×10^{-4}	
70.5		21680.8922			8.9780		4.1393×10^{-4}	
71.5		21671.8033			9.0889		4.1921×10^{-4}	
72.5		21662.6037			9.1996		4.2450×10^{-4}	
73.5		21653.2933			9.3104		4.2979×10^{-4}	
74.5		21643.8724			9.4209		4.3508×10^{-4}	
75.5		21634.3410			9.5314		4.4037×10^{-4}	
76.5		21624.6993			9.6417		4.4567×10^{-4}	
77.5		21614.9472			9.7521		4.5097×10^{-4}	
78.5		21605.0850			9.8622		4.5627×10^{-4}	
79.5		21595.1127			9.9723		4.6157×10^{-4}	
80.5		21585.0304			10.0823		4.6688×10^{-4}	

* 跃迁谱线能级差 $\Delta_J = \nu_{J-1} - \nu_J$, 跃迁谱线逐差比之差 $\Delta\text{Rate}_J = \text{Rate}_{J,\text{exp } t} - \text{Rate}_{J,\text{cal}}$.

从表 2 中可以看出, 利用 (1) 式计算得到的发射光谱不仅能够精确地重复已知实验光谱, 还获得了实验上难以得到的正确的高激发态谱线数据. Ram 等人^[9] 观测到了该谱带系的 34 条 P 支发射光谱线, 以这组谱线 ($m = 34$) 作为输入数据, 得到了包含高激发转动态 $J = 80.5$ 在内的所有跃迁谱线, 将它们和已知的实验谱线相比较, 绝对误差均不大于 0.07 cm^{-1} . 其中包括实验上尚未给出的多条较低跃迁谱线, 如转动量子数 $J = 29.5$ 的转动态, 本次计算预测该转动态的发射光谱线为 $\nu_{29.5} = 21957.1144 \text{ cm}^{-1}$. 在不久的将来, 若实验上能获得该转动态的精确数据, 那么它与理论数据比较的误差应该不会超过 0.1 cm^{-1} .

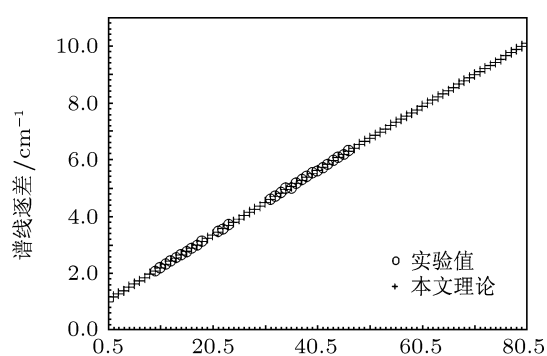


图 1 VO 分子 ${}^2\Delta_{3/2}-1^2\Delta_{3/2}$ 电子跃迁 (0, 0) 跃迁带 P 支的实验跃迁谱线逐差 $\Delta_J = \nu_{J-1} - \nu_J$ (“o”) 与理论谱线逐差 (“+”) 的比较

为了更好地说明所预测的 P 线系谱线的正确性, 通过图 1 中所示的一次谱线逐差 $\Delta_J = \nu_{J-1} - \nu_J$ 直观地描述了 (0, 0) 振转跃迁带谱线的变化规律. 图中的 “o” 表示该跃迁带的已知实验谱线逐差, “+” 表示的是由 (1) 式计算获得的理论谱线的逐差. 该图清晰地说明了两种谱线逐差符合非常好, 且理论逐差延续了实验逐差的线性发展趋

势. 这些数据和图比较充分地说明了用 (1) 式和物理判据 (2)—(4) 式获得的高激发振转态的发射谱线是正确可信的.

4 结论

由于 VO 分子高振转激发态的跃迁很不稳定, 实验上难以精确获得这部分的谱线数据, 本文利用孙卫国课题组建立的 (1) 式与实验上测量的 15 条精确的跃迁谱线, 和对应的上下振动态的离心畸变转动常数 ($D'_v, D_{v''}$), 首次对 VO 分子从电子态 ${}^2\Delta_{3/2}$ 到 $1^2\Delta_{3/2}$ 电子跃迁中 (0, 0) 跃迁带的 P 线系跃迁谱线进行了计算研究, 研究获得的计算结果不仅能重现已知的实验数据, 而且还正确地预测了该振转跃迁带包含了转动量子数 $J = 80.5$ 在内的 P 线系发射光谱, 同时所得的理论数据与已知的实验数据最大误差不超过 0.07 cm^{-1} . 对于误差最大的转动量子数 $J = 26.5$ 的转动态, 由于在其附近 $J = 25.5, J = 27.5$ 的转动态的实验数据都没有获得, 可以推断 VO 在该转动态附近的跃迁信号很不稳定, 难以取得精确的实验数据, 因此 $J = 26.5$ 的实验数据可能有较大误差. 事实上, 通过理论计算出来的数据与之对比, $\text{exp } t. - \text{cal.} = 0.0666 \text{ cm}^{-1}$, 也恰好说明了这一点.

本文为人们更正确、更深刻地认识 VO 分子的高振转激发跃迁结构提供了更丰富的物理信息, 为需要 VO 分子精确跃迁谱线数据的研究工作提供了必要的数据. (1) 式为研究双原子分子电子态的高振转激发态 P 线系跃迁谱线提供了一种非常有效又经济的方法, 是探索分子内部结构的一种有力工具.

- [1] Huang Y, Qi J, Pechkis H K, Wang D, Eyler E E, Gould P L, Stwalley W C 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** S857
- [2] Li H, Focsa C, Pinchemel B, Le Roy R J, Bernath P F 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 3026
- [3] Lang F, Winkler K, Strauss C, Grimm R, Denschlag J H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 133005
- [4] Ekey R C, Jr., Marks A, McCormack E F 2006 *Phys. Rev. A* **73** 023412
- [5] Herzberg G 1953 *Molecular spectra, and molecular structure (I): Spectra of diatomic molecules*, Nostrand D Van. 3rd Printing
- [6] Ram R S, Bernath P F, Davis S P, Merer A J 2002 *J. Mol. Spectro.*

211 279

- [7] Flory M A, Ziurys L M 2008 *J. Mol. Spectro.* **247** 76
- [8] Suenram R D, Fraser G T, Lovas F J, Gillies C W 1991 *J. Mol. Spectro.* **148** 114
- [9] Ram R S, Bernath P F 2005 *J. Mol. Spectro.* **229** 57
- [10] Du Q, Wang L, Shen X H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6308
- [11] Sun W G, Fan Q C, Li H D, Feng H 2011 *Spectrochim. Acta Part A* **79** 35
- [12] Fan Q C, Sun W G, Li H D, Feng H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 063301 (in Chinese) [樊群超, 孙卫国, 李会东, 冯灏 2011 物理学报 **60** 063301]

The P-branch emission spectral lines in the ${}^2\Delta_{3/2}—1^2\Delta_{3/2}$ system of VO molecule*

Liu Wei-Ning¹⁾ Fan Qun-Chao²⁾† Sun Wei-Guo²⁾³⁾‡ Feng Hao²⁾ Hu Shi¹⁾

1) (School of Material Science and Engineering, Research Center for Advanced Computation, Xihua University, Chengdu 610039, China)

2) (School of Physics and Chemistry, Research Center for Advanced Computation, Xihua University, Chengdu 610039, China)

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

(Received 21 December 2011; revised manuscript received 16 February 2012)

Abstract

The accurate P-branch emission spectra of the (0, 0) band in the ${}^2\Delta_{3/2}—1^2\Delta_{3/2}$ system of the VO molecule are studied in this work using the analytical formula derived by Sun group in their previous work. The calculated results generate correct values of the unknown spectral lines up to $J = 80.5$ which are not available experimentally for this band, as well as reproduce all known experimental spectral lines accurately.

Keywords: diatomic molecule, VO, emission spectral lines

PACS: 33.15.Mt, 34.50.Ez, 33.20.Sn, 33.20.Wr

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074204), the Youth Foundation (Grant No. 2012JQ0055) of the Department of Science and Technology, the Key Project (Grant No. 12ZA165) of Education Department of Sichuan Province, China.

† E-mail: fanqunchao@mail.xhu.edu.cn

‡ E-mail: swg@mail.xhu.edu.cn