

# AsCl 自由基的基态及激发态的势能函数与 光谱常数的研究\*

朱遵略† 郎建华 乔浩

(河南师范大学物理与电子工程学院, 新乡 453007)

(2012 年 12 月 19 日收到; 2013 年 2 月 24 日收到修改稿)

利用原子分子反应静力学推导出 AsCl 自由基的基态及激发态的理解极限. 采用完全活性空间自洽场和含 Davidson 修正的内收缩多参考组态相互作用理论方法, 在 aug-cc-pV5Z 基组下对 AsCl 自由基进行结构优化计算及单点能扫描计算. 在 AsCl 自由基基态势能曲线的基础上, 通过 Molcas 程序拟合出了 AsCl 的光谱常数  $D_e$ ,  $R_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e \chi_e$ ,  $B_e$  和  $\alpha_e$ . 通过求解双原子分子核运动的径向 Schrödinger 方程, 找到了  $J=0$  时该分子基态存在的 40 个振动态. 针对每一振动态, 计算了其振动能级、转动惯量  $B_v$  和离心畸变常数  $D_v$ , 与现有的实验及其他理论相比较, 本文的光谱参数和分子常数结果更准确.

关键词: AsCl, 势能函数, 光谱常数

PACS: 31.50.-x, 34.20.-b, 31.15.A, 33.15.Mt

DOI: 10.7498/aps.62.113103

## 1 引言

我国是白砷的最大生产国, 囊括了接近全球产量的 50%. 砷与其化合物被运用在农药与许多种的合金中. 三氯化砷是一种无机砷化合物, 是含有剧毒而无色的液体. AsCl 自由基是化学合成三氯化砷反应的中间体具有独特的光谱性质, 因此对砷及其化合物的研究有着现实的意义. 1967 年, Basco 等<sup>[1]</sup>用等温闪光光分解 AsCl<sub>3</sub> 分子, 在 245nm 附近观测到一组 violet-degraded 键的吸收光谱, 他们认为是 AsCl 自由基的吸收光谱. 得到的光谱常数  $\omega_e$  和  $\omega_e \chi_e$  分别是  $443 \text{ cm}^{-1}$  和  $2 \text{ cm}^{-1}$ . Kruse 等<sup>[2]</sup>于 1984 年用放电流系统在近红外光谱范围观测到 AsCl 和 AsBr 的  $b_0^+ \rightarrow X1^+$ ,  $X2^1$  键的化学发光, 通过分析光谱得到 AsCl 的光谱常数分别是:

$$\omega_e(X1, X2) = 424 \pm 6,$$

$$T_e(X2^1) = 140 \pm 8,$$

$$T_e(b_0^+) = 12573 \pm 10,$$

$$\omega_e(b_0^+) = 443 \pm 8 \text{ cm}^{-1}.$$

2006 年 David 等<sup>[3]</sup>用密度泛函理论和大范围内的从头算方法得到一系列的 AsCl 自由基的光谱常数  $R_e$  和  $\omega_e$ . 关于 AsCl 自由基的其他光谱常数及激发态的势能函数、光谱常数未见报道. 为了更全面的了解 AsCl 自由基的性质, 用于进一步的动力学计算, 需要更高精度的理论计算.

本文首先推导了 AsCl 自由基的基态及激发态合理的离解极限, 然后利用能充分反映相关能的多组态相互作用 (MRCI+Q)<sup>[4,5]</sup> 方法和相关一致基 aug-cc-pV5Z 基组<sup>[6,7]</sup>系统地 AsCl 自由基的基态和多个低电子激发态的势能曲线进行了计算. 最后, 通过求解双原子分子核运动的径向 Schrödinger 方程, 得到了 AsCl 自由基的分子常数.

## 2 理论方法与计算

### 2.1 AsCl 自由基的离解极限

根据原子分子反应静力学中的分离原子法<sup>[8]</sup>

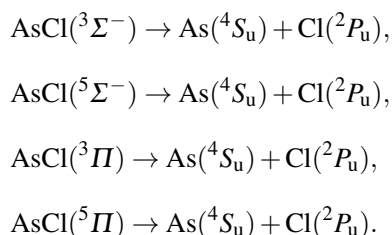
\* 国家自然科学基金 (批准号: 61177092) 和河南省基础与前沿技术研究项目 (批准号: 092300410038) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zl-zhu@htu.cn

由广义 Wigner-Witmer 规则确定可能的电子状态. As 和 Cl 原子的基电子结构分别为 $^4S_u$ 和 $^2P_u$ , 属于 $SU(n)$ 群, AsCl 属于 $C_{\infty v}$ 群. 当基态 As ( $^4S_u$ ) 与 Cl ( $^2P_u$ ) 原子对称性降低生成 AsCl 自由基时 $SU(n)$ 群的不可约表示可分解为 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示的直和, 通过直积和约化可得 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示, 即 AsCl 自由基的可能电子状态. As ( $^4S_u$ ) 和 Cl ( $^2P_u$ ) 分别分解为 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示的直和为

$$\begin{aligned} ^4S_u &\rightarrow ^4\Sigma_u^-, \\ ^2P_u &\rightarrow ^2\Sigma_u^+ + ^2\Pi_u, \\ ^4S_u \otimes ^2P_u &= ^4\Sigma^- \otimes (^2\Sigma^+ + ^2\Pi) \rightarrow ^{3,5}\Sigma^- \oplus ^{3,5}\Pi, \end{aligned}$$

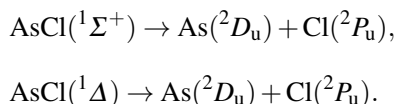
所以 AsCl 自由基可能的电子状态为 $^3\Sigma^-$ ,  $^5\Sigma^-$ ,  $^3\Pi$ ,  $^5\Pi$ , 根据微观过程可逆性原理, 这一过程的逆过程为其合理的离解极限



当原子态为 As ( $^2D_u$ ) 和 Cl ( $^2P_u$ ) 时, 分别将其分解为 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示的直和为

$$\begin{aligned} ^2D_u &\rightarrow ^2\Sigma_u^- + ^2\Pi_u + ^2\Delta_u, \\ ^2P_u &\rightarrow ^2\Sigma_u^+ + ^2\Pi_u, \\ ^2D_u \otimes ^2P_u &= (^2\Sigma^- + ^2\Pi + ^2\Delta) \otimes (^2\Sigma^+ + ^2\Pi) \\ &\rightarrow ^{1,3}\Sigma^+ \oplus ^{1,3}\Sigma^-(2) \oplus ^{1,3}\Pi(3) \oplus ^{1,3}\Delta(2) \oplus ^{1,3}\Phi, \end{aligned}$$

所以 AsCl 自由基可能的电子状态为 $^{1,3}\Sigma^-(2)$ ,  $^{1,3}\Sigma^+$ ,  $^{1,3}\Pi(3)$ ,  $^{1,3}\Delta(2)$ ,  $^{1,3}\Phi$ , 根据微观过程可逆性原理及能量过程最优原理可以确定 AsCl 自由基的离解极限为



## 2.2 AsCl 自由基的光谱常数

多组态相互作用方法 (MRCI) 是一种系统的从头计算方法, 是一种可靠的势能曲线计算方法. MOLPRO 使用的是 Abelian 点群, 对于对称性是 $C_{\infty v}$ 的线性分子 AsCl 由其子群 $C_{2v}$ 群替换.

$C_{2v}$ 共有 4 种类型的轨道, 其对应的不可约表示为 a1/b1/b2/a2. 对于含有 50 个电子的 AsCl 自由基, 分析其共有 27 个默认参与运算的分子轨道, 分别是 14 个 A1, 6 个 B1, 6 个 B2 和 1 个 A2 轨道. 其中 8 个属于开壳层轨道 (4A1, 2B1, 2B2), 分别对应于 As 原子的 4s4p 和 Cl 原子的 3s3p 轨道.

在计算过程中我们发现, 对于 $^3\Sigma^-$ ,  $^1\Delta$ ,  $^1\Sigma^+$  态计算只采用这 27 个分子轨道 (14A1, 6B1, 6B2, 1A2) 时所得的势能曲线出现跳变. 为了得到光滑的势能曲线, 我们将更多的轨道放入活化空间. 对于 $^3\Sigma^-$  态, 我们将 2 个额外的 A1 轨道放入活化空间; 对于 $^1\Delta$ ,  $^1\Sigma^+$  态参与计算的分子轨道是 15A1, 6B1, 6B2, 1A2, 此时所得势能曲线是光滑的.

本文对 As 和 Cl 原子都使用了相关一致基 aug-cc-pV5Z, 即对 As 原子由原始高斯基组 (26s, 17p, 13d, 3f, 2g, 1h), 并增加了扩散函数 (1s, 1p, 1d, 1f, 1g, 1h). Cl 原子是 (20s, 12p, 4d, 3f, 2g, 1h), 扩散函数是 (1s, 1p, 1d, 1f, 1g, 1h). 该基组是 Dunning<sup>[6,7]</sup> 提出的含有扩散函数的 5z 相关一致基, 能很好的描述原子间距离较大时的相互作用情况. 本文采用单点扫描计算获得势能曲线, 在 0.12—0.615 nm 范围内进行, 原子间距离的变化步长为 0.005 nm, 共扫描了 100 个势能点. 全部计算是在 MOLPRO2008.1 程序包<sup>[9]</sup>中完成的. 为了得到准确的光谱数据, 我们在整个计算范围内考虑了相对论效应对光谱常数计算的影响和 Davidson 修正<sup>[10]</sup>空间大小的一致性, 结果所得势能曲线光滑且完全收敛.

利用 AsCl 自由基的势能函数曲线求解径向 Schrödinger 方程, 找到了  $J=0$  时该分子基态及激发态的 40 个振动态. 利用 MOLCAS7.4<sup>[11]</sup> 程序包提供的 VIBROT 软件拟合出 AsCl 自由基的各个态相应的光谱常数.

## 3 结果与讨论

### 3.1 光谱常数

AsCl 自由基的各个电子态的平衡位置大致相同, 因此每条势能曲线的计算范围是 0.12—0.615 nm, 扫描步长为 0.005 nm, 共计算了 100 个点. 扫描得到的势能曲线如图 1 所示. 表 1 列出了 AsCl 自由基的基态及激发态的光谱常数. 为便于比较, 表 1 列入了实验值<sup>[1,2]</sup>.

1984 年, Kruse 等<sup>[2]</sup>用放电流动系统在近红外光谱范围观测到 AsCl 自由基的光谱常数  $\omega_e$  (X1,

X2) 为  $424 \pm 6 \text{ cm}^{-1}$  和  $\omega_e(\text{b0}^+) = 443 \pm 8 \text{ cm}^{-1}$ . 发现其基态数据与 Basco 等 [1] 的实验数据  $\omega_e = 443 \text{ cm}^{-1}$  相差很大, 而与  $\omega_e(\text{b0}^+) = 443 \pm 8 \text{ cm}^{-1}$  相一致, 于是他们指出 Basco 等 [1] 的实验数据为  $\text{b0}^+$  态而不是基态. 结合理论计算 [3] 及本文的计算可以肯定 Basco 等 [1] 的实验数据为  $^1\Sigma^+$  态. 2006 年 David 等 [3] 用密度泛函理论和从头算方法得到一系列的 AsCl 自由基的光谱常数  $R_e$  和  $\omega_e$ . 最后发现在 QCISD/6-311++G(3df, 3pd) 理论水平下得到的  $\omega_e$  和实验值 [2] 相符合, 其偏离实验数据为  $2.24 \text{ cm}^{-1}$  (0.5283%), 但是, 这些计算是基于单参考组态方法而且用的基组较小对相关能的计算和激发态的描述精度不高. 对于  $^3\Sigma^-$  和  $^1\Sigma^+$  态本文得到的  $\omega_e$  值偏差分别为  $1.319 \text{ cm}^{-1}$  (0.311%) 和  $0.34 \text{ cm}^{-1}$  (0.0767%) 显然优于文献 [3] 的理论计

算, 说明本文所采用的计算方法是可靠的, 计算得到的光谱常数可作为进一步实验测量和理论计算的参考.

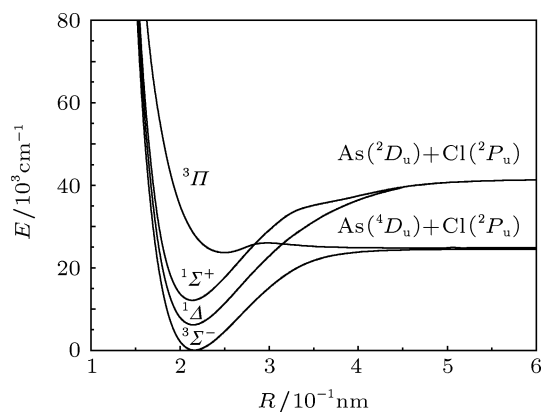


图 1 AsCl 自由基基态和低激发态的势能曲线计算水平 MRCl+Q/aug-cc-pV5Z

表 1 AsCl 自由基基态和低激发态的光谱常数及与实验结果和其它理论结果的比较

数据	$R_e/\text{nm}$	$\omega_e/\text{cm}^{-1}$	$\omega_e\chi_e/\text{cm}^{-1}$	$B_e/\text{cm}^{-1}$	$\alpha_e/\text{cm}^{-1}$	$D_0/\text{eV}$	$D_e/\text{eV}$
$^3\Sigma^-$							
本文计算	0.21593	422.681	1.40459	0.151585	0.000705523	3.0215	3.0477
实验结果 [2]	—	424	—	—	—	—	—
理论计算 [3]	0.21604	426.24	—	—	—	—	—
$^1\Delta$							
本文计算	0.21443	436.075	1.38106	0.153766	0.00070989	4.4048	4.4318
$^1\Sigma^+$							
实验结果 [1]	—	443	2	—	—	—	—
本文计算	0.21344	443.34	1.42076	0.155180	0.000715331	3.6658	3.6932
$^3\Pi$							
本文计算	0.24968	312.934	7.54926	0.119235	0.00219333	1.2768	1.2941

### 3.2 振动能级及惯性转动常数和离心畸变常数

由计算得到的势能曲线, 通过求解核运动的径向 Schrödinger 方程, 得到了  $J = 0$  时 AsCl 基态 ( $^3\Sigma^-$ ) 及激发态 ( $^1\Delta$ ,  $^1\Sigma^+$ ,  $^3\Pi$ ) 的 40 个振动态, 同时还分别计算了每一振动态的振动能级、转动惯量

和离心畸变常数等, 并将计算结果分别列入表 2 和表 3 中.

虽然没能找到 AsCl 自由基的振动能级、转动惯量、离心畸变常数的理论及实验值, 无法与本文所计算的结果进行比较. 但是表 1 中的计算结果与实验值较为相符. 因此, 表 2 和表 3 中的计算数据是可靠的.

表2 MRCI/aug-cc-pV5Z 理论水平下 AsCl 自由基基态 ( $^3\Sigma^-$ ) 及激发态 ( $^1\Delta$ ) 的振动能级、转动惯量和离心畸变常数

$v$	$G(v)/\text{cm}^{-1}$		$B_v/\text{cm}^{-1}$		$D_v/10^{-7} \text{cm}^{-1}$	
	$^3\Sigma^-$	$^1\Delta$	$^3\Sigma^-$	$^1\Delta$	$^3\Sigma^-$	$^1\Delta$
0	211.01	217.74	0.151290	0.153417	0.781244	0.764903
1	630.83	651.05	0.150567	0.152705	0.781189	0.764558
2	1047.87	1081.59	0.149844	0.151994	0.781011	0.764196
3	1462.13	1509.40	0.149122	0.151286	0.781382	0.764048
4	1873.57	1934.44	0.148402	0.150579	0.782202	0.764152
5	2282.16	2356.70	0.147683	0.149874	0.782791	0.764213
6	2687.90	2776.18	0.146965	0.149168	0.782517	0.763913
7	3090.82	3192.89	0.146248	0.148464	0.782159	0.763678
8	3490.93	3606.82	0.145530	0.147760	0.781969	0.763092
9	3888.24	4018.00	0.144811	0.147058	0.782008	0.763185
10	4282.75	4426.42	0.144090	0.146357	0.782589	0.763494
11	4674.43	4832.06	0.143371	0.145658	0.783986	0.764021
12	5063.27	5234.93	0.142655	0.144961	0.785848	0.764711
13	5449.24	5635.01	0.141941	0.144265	0.788122	0.765274
14	5832.34	6032.30	0.141231	0.143570	0.790378	0.765766
15	6212.55	6426.79	0.140523	0.142876	0.792540	0.766058
16	6589.87	6818.50	0.139816	0.142184	0.794433	0.766064
17	6964.29	7207.42	0.139110	0.141492	0.795714	0.766017
18	7335.81	7593.56	0.138401	0.140800	0.795911	0.765672
19	7704.44	7976.93	0.137691	0.140108	0.795222	0.765275
20	8070.19	8357.53	0.136977	0.139415	0.793736	0.764950
21	8433.08	8735.37	0.136259	0.138723	0.791756	0.764739
22	8793.12	9110.44	0.135538	0.138030	0.789665	0.764942
23	9150.32	9482.75	0.134812	0.137338	0.787586	0.765357
24	9504.69	9852.30	0.134083	0.136646	0.786005	0.766293
25	9856.22	10219.07	0.133350	0.135956	0.785191	0.767525
26	10204.92	10583.06	0.132616	0.135266	0.785565	0.769283
27	10550.78	10944.27	0.131880	0.134579	0.786930	0.771269
28	10893.78	11302.69	0.131144	0.133893	0.789152	0.773424
29	11233.90	11658.32	0.130408	0.133209	0.792304	0.776084
30	11571.13	12011.15	0.129671	0.132528	0.795908	0.779036
31	11905.45	12361.17	0.128935	0.131848	0.800354	0.782276
32	12236.84	12708.39	0.128200	0.131170	0.805690	0.785519
33	12565.27	13052.79	0.127464	0.130493	0.811732	0.788971
34	12890.73	13394.37	0.126729	0.129818	0.818422	0.792280
35	13213.18	13733.12	0.125994	0.129142	0.825789	0.795362
36	13532.61	14069.04	0.125259	0.128467	0.833565	0.798077
37	13849.00	14402.12	0.124523	0.127791	0.841640	0.800518
38	14162.31	14732.37	0.123785	0.127114	0.850075	0.802471
39	14472.53	15059.79	0.123045	0.126437	0.858433	0.803600

表3 MRCI/aug-cc-pV5Z 理论水平下 AsCl 自由基态 $^1\Sigma^+$  和 $^3\Pi$  态的振动能级、转动惯量和离心畸变常数

$v$	$G(v)/\text{cm}^{-1}$		$B_v/\text{cm}^{-1}$		$D_v/10^{-7} \text{cm}^{-1}$	
	$^1\Sigma^+$	$^3\Pi$	$^1\Sigma^+$	$^3\Pi$	$^1\Sigma^+$	$^3\Pi$
0	221.43	138.84	0.154838	0.113300	0.760502	0.749487
1	662.04	416.90	0.154118	0.113064	0.760847	0.735279
2	1099.74	695.49	0.153399	0.112787	0.761111	0.741759
3	1534.53	973.13	0.152681	0.112406	0.760966	0.777049
4	1966.46	1247.72	0.151964	0.111848	0.760765	0.852028
5	2395.53	1516.52	0.151247	0.111011	0.760871	0.990583
6	2821.74	1775.75	0.150531	0.109736	0.761209	1.25037
7	3245.09	2019.81	0.149816	0.107704	0.761417	1.79224
8	3665.55	2239.57	0.149101	0.104343	0.761864	2.70470
9	4083.13	2426.86	0.148387	0.100387	0.762453	2.36251
10	4497.82	2594.97	0.147675	0.983228	0.763093	1.90762
11	4909.62	2754.84	0.146965	0.960651	0.763606	2.23670
12	5318.52	2905.11	0.146256	0.941756	0.764490	1.99382
13	5724.52	3049.13	0.145547	0.922752	0.765429	2.10628
14	6127.61	3186.95	0.144839	0.906132	0.766192	2.06896
15	6527.79	3319.72	0.144131	0.889215	0.766756	2.01217
16	6925.06	3447.96	0.143423	0.873887	0.766925	2.08448
17	7319.42	3571.98	0.142714	0.858941	0.767023	2.00446
18	7710.88	3692.33	0.142006	0.844440	0.767039	2.00536
19	8099.45	3809.23	0.141297	0.830801	0.767104	2.02120
20	8485.12	3922.92	0.140587	0.817504	0.767502	1.97449
21	8867.89	4033.68	0.139877	0.804605	0.768441	1.96118
22	9247.77	4141.68	0.139167	0.792259	0.769878	1.96331
23	9624.73	4247.08	0.138457	0.780278	0.771547	1.93639
24	9998.76	4350.04	0.137747	0.768605	0.773423	1.91128
25	10369.87	4450.70	0.137039	0.757315	0.775485	1.90263
26	10738.04	4549.18	0.136333	0.746376	0.777836	1.88923
27	11103.28	4645.57	0.135628	0.735719	0.781051	1.86648
28	11465.56	4739.99	0.134923	0.725335	0.785091	1.84592
29	11824.88	4832.51	0.134218	0.715233	0.789206	1.83031
30	12181.21	4923.23	0.133514	0.705398	0.792960	1.81502
31	12534.55	5012.21	0.132811	0.695808	0.796241	1.79810
32	12884.89	5099.52	0.132110	0.686449	0.799468	1.77979
33	13232.24	5185.23	0.131408	0.677307	0.803658	1.76059
34	13576.58	5269.39	0.130704	0.668372	0.809562	1.74230
35	13917.88	5352.07	0.129994	0.659644	0.815780	1.72682
36	14256.09	5433.30	0.129278	0.651117	0.818949	1.71265
37	14591.22	5513.14	0.128564	0.642777	0.816437	1.69656
38	14923.30	5591.64	0.127858	0.634607	0.810174	1.67770
39	15252.44	5668.83	0.127160	0.626599	0.811689	1.65889

## 4 结论

本文对 AsCl 自由基的基态 ( $^3\Sigma^-$ ) 和 3 个电子激发态 ( $^1\Delta$ ,  $^1\Sigma^+$ ,  $^3\Pi$ ) 运用含 Davidson 修正的多参考组态相互作用 (MRCI+Q) 方法和扩散基组 aug-cc-pV5Z 进行了单点能扫描计算, 根据原子分子反应静力学推导确立了各条曲线对应的电子态及离

解极限. 最后通过求解径向 Schrödinger 方程, 找到了  $J=0$  时 AsCl 自由基的基态及激发态的部分 40 个振动态, 并得到了每一振动态的振动能级、离心畸变常数、转动惯量等分子常数. 所得数据为以后 AsCl 自由基实验和理论上的研究提供可靠的理论依据.

- [1] Basco N, Yee K K 1967 *J. Chem. Commun.* 1255
- [2] Kruse H, Winter R, Fink E H, Wildt J, Zabel F 1984 *Chem. Phys. Lett.* **111** 100
- [3] David R Urban, Jennifer Wilcox 2006 *J. Phys. Chem.* **110** 5847
- [4] Werner H J, Knowles P J 1988 *J. Chem. Phys.* **89** 5803
- [5] Knowles P J, Werner H J 1988 *Chem. Phys. Lett.* **145** 514
- [6] Woon D E, Dunning T H 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1358
- [7] Dunning T H, Jr 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 1007
- [8] Zhu Z H 2007 *Atomic and Molecular Reaction Statics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [朱正和 2007 原子分子反应静力学 (北京: 科学出版社) 第 39 页]
- [9] Werner H J, Knowles P J, Lindh R, Manby F R, Schütz M, Celani P, Korona T, Mitrushenkov A, Rauhut G, Adler T B, Amos R D, Bernhardsson A, Berning A, Cooper D L, Deegan M J O, Dobbyn A J, Eckert F, Goll E, Hampel C, Hetzer G., Hrenar T, Knizia G., Köppl C, Liu Y, Lloyd A W, Mata R A, May A J, McNicholas S J, Meyer W, Mura M E, Nicklass A, Palmieri P, Pflüger K, Pitzer R, Reiher M, Schumann U, Stoll H, Stone A J, Tarroni R, Thorsteinsson T, Wang M, Wolf A 2008 *A Package of ab Initio Programs*
- [10] Langhoff S R, Davidson E R 1974 *Int. J. Quantum Chem.* 861
- [11] Krogh J W, Lindh R, Malmqvist P A, Roos B O, Veryazov V, Widmark P O 2009 *User Manual Molcas Version 7.4* (Lund: Lund University)

# Study on spectroscopic properties and molecular constants of the ground and excited states of AsCl free-radical\*

Zhu Zun-Lue<sup>†</sup> Lang Jian-Hua Qiao Hao

(College of Physics and electronic Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

(Received 19 December 2012; revised manuscript received 24 February 2013)

## Abstract

The dissociation limit of AsCl free-radical is correctly determined based on group theory and atomic and molecular statics. Potential energy curves (PECs) for the ground state and several low-lying electronic excited states of AsCl free-radical are calculated using the multi-reference configuration interaction method with the basis set of aug-cc-pV5Z where the Davidson correction is considered as an approximation to full CI. Separation parameters ( $R_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $D_0$ ,  $D_e$ ,  $B_e$  and  $\alpha_e$ ) are evaluated using the PEC of AsCl. Spectroscopic parameters are compared with those reported in the literature, and excellent agreement is found between them. With the PEC of AsCl free-radical, forty vibrational states of AsCl free-radical are predicted when  $J = 0$  by numerically solving the radial Schrödinger equation of nuclear motion. For each vibrational state, the vibrational levels and inertial rotation constants are reported.

**Keywords:** AsCl, potential energy function, spectroscopic parameter

**PACS:** 31.50.-x, 34.20.-b, 31.15.A, 33.15.Mt

**DOI:** 10.7498/aps.62.113103

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61177092), and the Science and Technology Development Program of Henan Province, China (Grant No. 092300410038).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: zl-zhu@htu.cn