

SF 分子基态及低激发态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)

(2013年3月15日收到; 2013年5月13日收到修改稿)

采用含 Davidson 修正的内收缩多参考组态相互作用的方法和考虑相对论修正, 在价态范围内的最大相关一致基 aug-cc-pV6Z 的条件下, 对 SF 分子的基态 $^2\Pi$ 及几个低激发态 $^4\Sigma^-$, $^2\Sigma^-$, $^2\Delta$ 进行了势能扫描计算. 对 SF 分子的势能曲线进行拟合, 得到了该分子的光谱常数 R_e , ω_e , $\omega_e x_e$, D_0 , D_e , B_e 和 α_e , 通过比较发现它们与已有的实验结果较为一致. 利用 SF 分子的势能曲线, 通过求解双原子分子核运动的径向 Schrödinger 方程得到 $J=0$ 时 SF 分子所计算各电子态的多个振动态. 对于每一振动态, 分别计算了振动能级、惯性转动常数和离心畸变常数.

关键词: SF, 势能曲线, 光谱常数, 分子常数

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

DOI: 10.7498/aps.62.163103

1 引言

氟化硫 (SF) 分子及其单价离子是淬灭剂和灭弧介质的成分, 对 SF 分子结构和热力学性质的研究一直是双原子分子体系研究中的热点之一. 而且当前 SF₆ 在冷冻工业中作为致冷剂, 其致冷范围可在 $-45\sim 0^\circ\text{C}$ 之间. 在电气工业中由于其具有很高的介电强度和良好的灭电弧性能, 常被用作高压开关、大容量变压器、高压电缆和气体的绝缘材料. 在采矿工业中用作反吸附剂, 用于矿井煤尘中置换氧. 所以对于氟化硫分子的研究具有现实意义.

实验方面, Carrington 等^[1] 于 1969 年通过气相电子顺磁共振技术首次观察到 SF 分子的基态光谱, 得到了基态 $^2\Pi_i$ 的分子常数 B_0 ; 在 1970 年 Di Lonardo 和 Trombetti^[2] 在 400—330 nm 范围内观测到 F 原子和 COS 的反应产物 SF 分子基态的吸收光谱并且分析了它的转动和振动常数, 确定了基态的离解能小于 26500 cm^{-1} . 1973 年 Hildenbrand^[3] 报道了大量的气态氟化物的光谱研究, 同时得到了 SF 分子基态的离解能为 $3.51\text{ eV} \pm 0.05\text{ eV}$. 随后, 多位实验工作者对该分子进行了研究. Endo 等

[4,5] 于 1982 年和 1983 年用气相微波和红外激光二极管光谱仪分析了 SF 分子激发态的振动旋转光谱常数. 然而对于 SF 分子基态及部分光谱常数和振动态的分子常数却研究不多. Reddy 等^[6] 用 Rydberg-Klein-Rees 方法和 Endo 等的计算出了 SF 分子基态的离解能. Morino 和 Yamada^[7] 在毫米及亚毫米波范围内, 用返波振荡器作为辐射源的光谱仪测量出 SF 分子基态的转动跃迁.

理论方面, 1970 年 O'Hare 和 Wahl^[8] 首次用 Hartree-Fock (HF) 波函数计算 SF 分子的基态结构和 SF⁽ⁿ⁾ ($n = -1, 0, +1$) 的电离能; 1972 年 Companion^[9] 研究了大量的由 S 原子和 F 原子构成的混合物的结合能的分子轨道. Staemmler^[10] 于 1982 年用耦合电子对近似 (CEPA) 方法计算开壳层分子, 得到 SF 分子的谐振频率. 随后 Ziegler 和 Gutsev^[11] 用密度泛函理论研究了 SF_n ($n = 1, 5$) 的分子和电子结构, 指出 SF 分子的电子结构决定于 S(3p_s) 和 F(3s_s) 轨道. Irikura^[12] 用 MP2 方法及 6-31G* 基组研究了该分子的结构及热力学性质. Bauschlicher^[13] 用 B3LYP 和耦合簇 (CCSD (T)) 方法研究了 SF 分子的谐振频率和能量. Zivny 和 Czernk^[14,15] 先后于 1999 年和 2004 年分别用 CCSD(T) 方法及 aug-cc-pVQZ 基组和 cc-pVQZ 基

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274097, 61275132) 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

组得到 SF 分子的谐振频率和分子常数. 随着从头算理论的发展, 已报道了大量的关于 SF 分子基态的数据 [15–18].

本文利用能够系统反映相关能的内收缩多参考组态相互作用 (MRCI+Q) 方法 [19,20] 和价态范围内的最大的非收缩相关一致基 aug-cc-pv6Z 基组 [21,22] 对 SF 分子基态和多个低激发态的势能曲线进行计算, 该计算是在 MOLPRO2008.1 程序包 [23] 中进行的. 利用这些势能曲线拟合出 SF 分子的分子常数, 最后通过求解双原子分子核运动的径向 Schrödinger 方程, 找到了 $J=0$ 时该分子存在的多个振动态, 并进一步计算得到了部分振动态的转动惯量和离心畸变常数.

2 理论方法

MRCI 是一种系统的从头计算方法, 是目前最有效的处理相关能和可靠的势能曲线计算方法 [24,25]. MOLPRO 使用的是 Abelian 点群. 这就意味着, 对于对称性是 $C_{\infty v}$ 的线性分子 SF, 计算中由其子群 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 $a_1/b_1/b_2/a_2$. 对于含有 25 个电子的 SF 分子, 分析其共有 14 个默认参与运算的分子轨道, 分别是 8 个 A_1 , 3 个 B_1 , 3 个 B_2 轨道. 其中 8 个属于开壳层轨道 ($4A_1, 2B_1, 2B_2$), 分别对应于 F 原子的 $2s2p$ 和 S 原子的 $3s3p$ 轨道.

MRCI 计算以 CASSCF 波函数为参考波函数, 其形式为:

$$\Psi = \sum_l c^l \Psi_l + \sum_s \sum_{\alpha} c_{\alpha}^s \Psi_s^{\alpha} + \sum_p \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta}^p \Psi_p^{\alpha\beta},$$

其中 s, p 分别表示内电子数 $N=1$ 和 $N=2$ 的状态; α 和 β 表示非占据的外轨道, Ψ_l, Ψ_s 和 Ψ_p 分别表示内电子、单外层和双外层电子组态. 本文对 S 和 F 原子都使用了相关一致基 aug-cc-pV6Z, 即对 S 原子由原始高斯基组 (21s, 14p, 5d, 4f, 3g, 2h, 1i), 并增加了扩散函数 (1s, 1p, 1d, 1f, 1g, 1h, 1i). F 原子是 (16s, 10p, 5d, 4f, 3g, 2h, 1i), 扩散函数是 (1s, 1p, 1d, 1f, 1g, 1h, 1i). 该基组是 Dunning [21,22] 提出的含有扩散函数的六-zeta 相关一致基, 能很好地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 0.1–0.595 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. 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, 结果所得势能曲线光滑且完全收敛.

利用 SF 分子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 3 个激发态的多个振动态. 利用 MOLCAS7.4 [26] 程序包提供的 VIBROT 软件拟合出 SF 分子各个态相应的光谱常数.

3 结果与讨论

3.1 光谱常数

表 1 列出了 SF 分子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 [1–5] 及其他的理论计算结果 [12,14,15,17,18]. 扫描得到的势能曲线如图 1 所示.

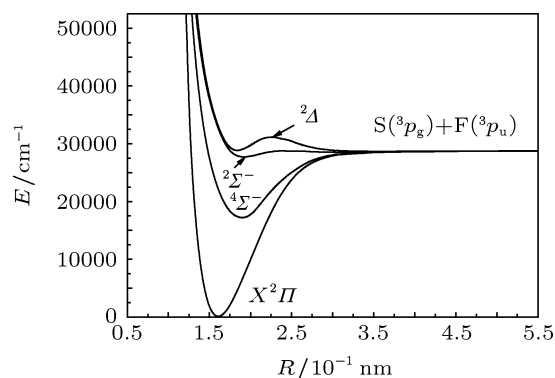


图 1 SF 分子基态和低激发态的势能曲线, 计算水平 MRCI+Q/aug-cc-pV6Z

早在 1962 年, Irikura [12] 用 MP2 方法在 6-31G* 基组下研究了该分子的结构及热力学性质. 对于 SF 分子基态 $X^2\Pi$, 得到了光谱常数 R_e , ω_e 和 D_0 分别为 1.627 nm, 823 cm^{-1} 和 3.5736 eV. 与已有的实验数据对比, 其 R_e 和 D_0 偏离实验结果 [1] 分别为 1.65% 和 1.83%, R_e 和 ω_e 偏离实验 [4,5] 分别为 1.93% 和 1.75%, 显然多体微扰理论方法的计算可靠性不如多参考态, 而且 Irikura [12] 只计算了三个光谱常数.

Zivny 和 Czernk [14] 于 1999 年分别用 CCSD(T) 及 aug-cc-pVQZ 基组得到 SF($X^2\Pi$) 分子的部分光谱常数 R_e 和 ω_e . 与文献 [1] 相比, 其 R_e 值高出 0.0005 nm (0.31%); 与文献 [4, 5] 相比, 其 R_e 和 ω_e 分别偏差 0.0009 nm (0.58%) 和 1.2818 cm^{-1} (0.15%), 比 Irikura [12] 等的计算精度明显提高. 但其只计算了这两个分子常数, 因而结果存在很大的局限性.

表 1 SF 分子基态和低激发态的光谱常数及与实验结果和其他理论结果的比较

数据	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e\chi_e/\text{cm}^{-1}$	B_e/cm^{-1}	α_e/cm^{-1}	D_0/eV	D_e/eV
$X^2\Pi$							
本文计算	0.16040	841.561	4.94421	0.549767	0.00447743	3.5093	3.5613
实验结果 ^[1]	0.1600574	—	—	0.552	—	—	—
实验结果 ^[2]	—	—	—	0.553	—	—	≤ 3.3
实验结果 ^[3]	—	—	—	—	—	—	3.51 ± 0.05
实验结果 ^[4,5]	0.1596244	837.6418	4.46953	0.555	0.004459	—	—
理论计算 ^[12]	0.1627	823	—	—	—	3.5736	—
理论计算 ^[14]	0.160558	836.36	—	—	—	—	—
理论计算 ^[17]	0.16025	839	4.7	—	—	—	—
理论计算 ^[15]	0.1602	844.134	4.156	—	0.00435	3.613	—
理论计算 ^[18]	0.16	849.0151	3.993	0.552	0.00424	—	3.582
$^4\Sigma^-$							
本文计算	0.19	519.815	7.04206	0.391667	0.00347923	1.4076	1.4401
$^2\Sigma^-$							
本文计算	0.19163	361.891	8.21959	0.383976	0.00696942	0.1125	0.1347
$^2\Delta$							
本文计算	0.18261	485.141	2.417	0.423854	0.00608421	0.7221	0.7521

Nielsen 等^[17]用 CCSD(T) 方法分别在 aug-cc-pVXZ ($X = \text{D, T, Q}$) 和考虑核相关效应的基组 aug-cc-pwCVXZ ($X = \text{D, T}$) 下计算 R_e 和 ω_e . 通过对比发现在 aug-cc-pVQZ 基组下得到的数据和实验值^[4,5] 较为接近, 其偏离实验值分别达到 0.0006 nm (0.39%) 和 1.3582 cm^{-1} (0.162%), 由于所采用的方法是单参考态方法, 计算结果没有多参考态高.

Zivny 和 Czernk^[15]于 2004 年再次用 CCSD(T) 在 cc-pVQZ 基组下计算光谱常数 R_e , ω_e , $\omega_e\chi_e$, α_e 和 D_0 , 其中 R_e , ω_e 和 $\omega_e\chi_e$ 偏离实验值^[4,5] 分别为 0.36%, 0.775%, 1.57%. 与其早前的工作相比, 虽然计算得到的光谱常数增多, R_e 数据更贴近实验值, 但 ω_e 的计算值偏大.

随后在 2011 年肖夏杰等^[18]基于 Gaussian03 软件包, 利用密度泛函理论的 B3P68 方法, 优选出 6-311g(3df), 6-311++g(3df), D95++(3df) 基组对 SF 分子基态进行几何优化和频率计算及单点能扫描计算, 最后采用最小二乘法拟合得到光谱常数 R_e , ω_e , $\omega_e\chi_e$, B_e , 与已有的实验数据^[4,5] 相比较, 其偏差各为 0.23%, 1.36%, 10.66%, 0.54%, 所得数据较

好, 然而其计算所得 D_e 值与实验数据^[3] 相比偏差较大.

对于 SF 分子, 通过以上的讨论和表 1 中的数据比较可知, 本文的光谱计算结果与实验值^[1-5] 符合很好. 计算所得的 R_e 与实验值^[1,4,5] 相比, 误差分别只有 0.214% 和 0.486%; ω_e 和 $\omega_e\chi_e$ 值与实验值^[4,5] 相比分别仅为 0.468%, 1.62%; B_e 和实验值^[1,2,4,5] 的相比误差分别是 0.4%, 0.58%, 0.94%; 而且 D_e 在实验值^[3] 的范围内. 因此本文在总体上明显优于已有的理论值, 且更为完整, 说明本文所采用的计算方法是可靠的.

3.2 振动能级及惯性转动常数和离心畸变常数

依据得到的势能曲线, 通过求解核运动的径向 Schrödinger 方程, 找到了 $J = 0$ 时 SF 分子的基态 ($X^2\Pi$), 激发态 ($^4\Sigma^-$, $^2\Sigma^-$, $^2\Delta$) 部分 40 个, 33 个, 13 个和 12 个振动态. 利用 MOLCAS7.4^[26] 计算了每一振动态的振动能级、转动惯量及离心畸变常数等, 将计算结果列入表 2 和表 3 中.

表 2 MRCI/aug-cc-pV6Z 理论水平下 SF 分子基态 ($X^2\Pi$) 及激发态 ($^4\Sigma^-$) 的振动能级、转动惯量和离心畸变常数

v	$G(v)/\text{cm}^{-1}$		B_v/cm^{-1}		$D_v/10^{-7} \text{cm}^{-1}$	
	$X^2\Pi$	$^4\Sigma^-$	$X^2\Pi$	$^4\Sigma^-$	$X^2\Pi$	$^4\Sigma^-$
0	419.54	261.66	0.547535	0.393264	9.39184	8.5103
1	1251.50	794.79	0.543103	0.395612	9.38449	8.01335
2	2074.34	1339.73	0.538707	0.396829	9.376	8.49011
3	2888.14	1884.18	0.534314	0.396576	9.34944	9.27277
4	3693.12	2420.81	0.529891	0.395153	9.31164	9.94658
5	4489.40	2946.71	0.525445	0.393033	9.28603	10.5607
6	5276.95	3460.70	0.521009	0.390261	9.28626	11.1948
7	6055.65	3961.85	0.516608	0.387063	9.32278	11.7049
8	6825.31	4450.10	0.512257	0.38343	9.38078	12.3527
9	7585.77	4924.89	0.507936	0.379416	9.43006	12.872
10	8336.95	5386.21	0.503630	0.375074	9.46446	13.4994
11	9078.87	5833.77	0.499312	0.370372	9.4692	14.1132
12	9811.56	6267.38	0.494960	0.365347	9.44212	14.7488
13	10535.12	6686.86	0.490552	0.360027	9.38554	15.3314
14	11249.65	7092.22	0.486077	0.354445	9.31116	15.9654
15	11955.21	7483.42	0.481533	0.348609	9.23895	16.5321
16	12651.81	7860.56	0.476925	0.342608	9.18296	16.9636
17	13339.41	8224.01	0.472264	0.336504	9.15805	17.3633
18	14017.92	8574.18	0.467559	0.330327	9.17101	17.8141
19	14687.18	9811.39	0.462822	0.324032	9.2278	18.4357
20	15347.00	9235.72	0.458064	0.317457	9.33284	19.5933
21	15997.18	9546.57	0.453288	0.310337	9.4847	21.5094
22	16637.45	9842.64	0.448494	0.302341	9.68031	24.1602
23	17267.54	10122.07	0.443676	0.293188	9.91374	28.0484
24	17887.18	10382.31	0.438825	0.282288	10.183	34.5218
25	18496.06	10619.46	0.433933	0.268945	10.4897	41.6848
26	19093.87	10829.96	0.428986	0.25343	10.836	75.4429
27	19680.29	10998.95	0.423971	0.215368	11.2225	117.018
28	20254.95	11107.87	0.418865	0.203323	11.6514	26.8901
29	20817.48	11231.20	0.413638	0.191839	12.1244	130.708
30	21367.43	11317.12	0.408254	0.181058	12.6396	90.3727
31	21904.33	11396.54	0.402672	0.150294	13.1959	21.1574
32	22427.63	11458.64	0.396848	0.137609	13.7956	98.2455
33	22936.74	—	0.390741	—	14.4434	—
34	23431.01	—	0.384310	—	15.1507	—
35	23909.75	—	0.377510	—	15.9456	—
36	24372.18	—	0.370288	—	16.8389	—
37	24817.45	—	0.362604	—	17.8375	—
38	25244.68	—	0.354416	—	19.003	—
39	25652.93	—	0.345659	—	20.3948	—

表3 MRCI/aug-cc-pV6Z 理论水平下 SF 分子激发态 $^2\Sigma^-$ 和 $^2\Delta$ 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/cm^{-1}		$D_v/10^{-6} \text{cm}^{-1}$	
	$^2\Sigma^-$	$^2\Delta$	$^2\Sigma^-$	$^2\Delta$	$^2\Sigma^-$	$^2\Delta$
0	178.58	241.84	0.379788	0.420603	1.83275	1.27815
1	515.88	718.26	0.367211	0.412847	2.26381	1.29069
2	814.09	1179.03	0.597894	0.403413	218.386	1.50285
3	831.03	1608.71	0.447153	0.391093	124.38	1.98891
4	875.12	1994.10	0.443383	0.377647	192.263	1.75805
5	913.72	2366.67	0.391872	0.376526	164.928	0.249009
6	947.23	2786.58	0.339673	0.384602	137.4	0.10684
7	975.70	3262.19	0.289351	0.391732	111.627	0.456439
8	998.88	3782.05	0.244416	0.397055	88.7989	0.811026
9	1017.24	4337.73	0.211867	0.400824	72.7904	1.29095
10	1029.69	4922.62	0.220544	0.402523	73.9508	2.27548
11	1038.17	5528.40	0.260206	0.398679	84.1752	6.16736
12	1048.68	—	0.246637	—	66.5363	—

遗憾的是, 我们没有找到 SF 分子的振动能级、转动惯量和离心畸变常数的实验值和理论值, 因此无法进行比较。但是通过表 1 中的结果与已有的实验值非常符合, 我们可以得出这样的结论, 表 2 和表 3 中的 SF 分子的振动能级、转动惯量常数和离心畸变常数是可靠的。

4 结论

本文对 SF 分子基态和几个低电子激发态运用 MRCI+Q 方法, 考虑相对论修正情况下和价态

范围内的最大相关一致基 aug-cc-pV6Z, 于 0.1—0.595 nm 核间距范围得到了其势能曲线, 然后 MOLCAS 程序中的 VIBROT 模块将扫描数据进行拟合得到各个态的光谱常数 (R_e , ω_e , $\omega_e \chi_e$, B_e 和 α_e)。所有结果都与实验值符合很好。利用本文得到的势能曲线, 通过求解核运动的径向薛定谔方程, 找到了 $J=0$ 是 SF 分子基态及激发态的多个振动态, 然后分别计算了部分振动态的振动能级、转动惯量和离心畸变常数等分子常数。本文结果与实验值及其他的理论结果相比更为准确和完整。

- [1] Carrington A, Currie G N, Miller T A, Levy D H 1969 *J. Chem. Phys.* **50** 2726
- [2] Di Lonardo G, Trombetti A 1970 *Trans. Faraday Soc.* **66** 2694
- [3] Hildenbrand D L 1973 *J. Phys. Chem.* **77** 897
- [4] Endo Y, Saito S, Hirota E 1982 *J. Mol. Spectrosc.* **92** 443
- [5] Endo Y, Nagai K, Yamada C, Hirota E 1983 *J. Mol. Spectrosc.* **97** 213
- [6] Reddy R R, Reddy A S R, Rao T V R 1986 *J. Quant. Spectrosc. RA.* **35** 167
- [7] Morino I, Yamada K M T 2001 *J. Mol. Spectrosc.* **207** 10
- [8] O'Hare P A G, Wahl A C 1970 *J. Chem. Phys.* **53** 2834
- [9] Companion A L 1972 *Theor. Chim. Acta* **25** 268
- [10] Staemmler V 1982 *Theor. Chim. Acta* **62** 69
- [11] Ziegler T, Gutsev G L 1992 *J. Chem. Phys.* **96** 7623
- [12] Irikura K K 1995 *J. Chem. Phys.* **102** 5357
- [13] Bauschlicher Jr C W, Ricca A 1998 *J. Phys. Chem. A* **102** 4722
- [14] Živný O, Czernek J 1999 *Chem. Phys. Lett.* **308** 165
- [15] Czernek J, Živný O 2004 *Chem. Phys.* **303** 137
- [16] Baluja K L, Tossell J A 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 19
- [17] Nielsen I M B, Zou S L, Bowman J M, Janssen C L 2002 *Chem. Phys. Lett.* **352** 26
- [18] Xiao X J, Zhao Q 2011 *Journal of Southwest University (Natural Science Edition)* **33** 81 (in Chinese) [肖夏杰, 赵起 2011 西南大学学报 (自然科学版) **33** 81]
- [19] Werner H J, Knowles P J 1988 *J. Chem. Phys.* **89** 5803
- [20] Knowles P J, Werner H J 1988 *Chem. Phys. Lett.* **145** 514
- [21] Woon D E, Dunning T H 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1358
- [22] Dunning T H 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 1007
- [23] 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, Me Yer 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*
- [24] Zhu Z L, Kou S H, Zang X N 2011 *Chin. J. Struct. Chem.* **30** 748
- [25] Liu H, Shi D H, Sun J F, Zhu Z L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 063101 (in Chinese) [刘慧, 施德恒, 孙金锋, 朱遵略 2011 物理学报 **60** 063101]
- [26] 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)

Spectroscopic properties and molecular constants of the ground and excited states of SF molecule*

Zhu Zun-Lüe[†] Lang Jian-Hua Qiao Hao

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

(Received 15 March 2013; revised manuscript received 13 May 2013)

Abstract

The potential energy curves (PEC) for the ground state ($X^2\Pi$) and three excited states ($^4\Sigma^-$, $^2\Sigma^-$, $^2\Delta$) of SF molecule are computed using the multireference configuration interaction method and the basis sets aug-cc-pV6Z where the Davidson correction is considered as an approximation to full CI. The separation parameters (R_e , ω_e , $\omega_e\chi_e$, D_0 , D_e , B_e and α_e) are evaluated using the PEC of SF. The spectroscopic parameters are compared with those reported in the literature, and excellent agreement is found between them. With the PEC of SF, some vibrational states of SF are predicted when $J=0$ by numerically solving the radical Schrödinger equation of nuclear motion. For each vibrational state, the vibrational levels and inertial rotation constants are reported.

Keywords: SF, potential energy function, spectroscopic parameter, molecular constant

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

DOI: 10.7498/aps.62.163103

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274097, 61275132) and the Science and Technology Development Program of Henan Province, China (Grant No. 092300410038).

[†] Corresponding author. E-mail: zl-zhu@htu.cn