

文章编号: 1000-0364(2007)06-1155-06

AlC, SiC 基态分子结构与分析势能函数的 量子力学计算

许永强, 高晓明, 张为俊

(中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光谱学研究室, 合肥 230031)

摘要: 用密度泛函理论的 B3LYP 方法和二次组态相互作用(QCISD(T))方法, 选择 6-31G(d, p), 6-311++G(2df, 2pd), 6-311++G(3df, 3pd), cc-PVTZ, AUG-cc-PVTZ 基组, 优化计算了 AlC 和 SiC 分子基态的能量, 平衡结构, 谐振频率. 根据原子分子反应静力学原理, 导出了 AlC 和 SiC 分子基态的合理离解极限和离解能. 通过优化计算结果和实验数据的对比, 选择 QCISD(T)/6-311++G(3df, 3pd) 方法对 AlC 和 SiC 分子基态的势能面进行了单点能扫描. 采用最小二乘法拟合得到了 AlC 和 SiC 分子基态的 Murrell-Sorbie 势能函数. 同时计算了光谱参数($B_e, \alpha_e, \omega_e, \omega_e \chi_e$)和力常数(f_2, f_3, f_4), 并与实验结果进行比较. 结果表明, 计算结果与实验数据吻合的较好.

关键词: AlC; SiC; 分子结构; 分析势能函数

中图分类号: O561.1 **文献标识码:** A

The quantum mechanical calculations on the molecular structure and analytical potential energy function of the ground states of AlC and SiC molecules

XU Yong-qiang, GAO Xiao-ming, ZHANG Wei-jun

(Laboratory of Environment Spectroscopy, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract: Selecting 6-31G(d, p), 6-311++G(2df, 2pd), 6-311++G(3df, 3pd), cc-PVTZ, AUG-cc-PVTZ basis sets, the energies, equilibrium structure, and harmonic frequency of the ground states of AlC and SiC molecules are calculated using density functional theory (B3LYP) method and quadratic CI method including single, double and triple substitutions (QCISD(T)). Based on the theory of atomic and molecular statics, the reasonable dissociation limit and dissociation energy of the ground states of AlC and SiC molecules are derived. By comparing the results of calculations with experimental data, the potential energy surface of the ground states of AlC and SiC molecules are scanned selecting QCISD(T)/6-311++G(3df, 3pd) method. The potential energy curves of the ground states of AlC and SiC molecules are obtained by least square fitting to the Murrell-Sorbie potential energy function. The spectroscopic parameters ($B_e, \alpha_e, \omega_e, \omega_e \chi_e$) and force constants (f_2, f_3, f_4) are calculated and compared with experimental results. It indicate that the results of

收稿日期: 2006-09-04

作者简介: 许永强(1978-), 男, 湖南邵阳人, 中科院安徽光机所硕士研究生. E-mail: qiangyongxu@163.com

calculations are in good agreement with the experimental data.

Key words: AlC, SiC, molecular structure, analytical potential energy function

1 引言

分子势能函数是研究原子分子碰撞和分子反动力学的基礎,也是研究分子稳定性的依据.它在辐射化学、激光化学等方面有广泛应用.近年来,分子的分析势能函数的研究已经相当丰富,有不少关于这方面的研究报道^[1-5].双原子分子以及其自由基的结构相对比较简单,其分析势能函数的形式也相对比较简单,但其物理和化学性质在许多领域的应用是非常重要的,如天文、催化方面.碳化物双原子分子是最简单的双原子分子之一,其理论和实验的研究也有不少报道.王红艳等^[6]采用相对论有效原子实模型(RECP)的 *ab initio* 计算方法对 UC 进行了量子力学理论计算.范鲜红等^[7]采用密度泛函(B3LYP)方法,对 EuC 分子的电子态结构和稳定性进行了理论研究.李赣等^[8]用密度泛函的 B3LYP 方法计算了 PuC 的平衡结构和光谱数据.朱正和和汪蓉^[9]在 QCISD/6-311G* 水平对 C2 分子的二价和三价离子进行了准确的量子力学计算,确定了其可能电子态的离解极限和分析势能函数. Balfour 等^[10]用电子光谱技术研究了超声分子束冷却的 FeC 分子的带,转动常数等. Steimle 等^[11]利用分子束光学斯塔克效应测量了含 Pt 的双原子分子如 PtC, PtS 的基态和激发态的永久电偶极矩. Marr 等^[12]用高分辨率的激光诱导荧光光谱技术研究了含重金属元素的 IrC 分子的偶极矩,光谱参数和光束斯塔克效应. Morse 和他的同事一起用双光子离子化共振谱(Resonant Two-Photon Ionization Spectroscopy)广泛研究了 RuC^[13], PdC^[14], NiC^[15]等碳化物双原子分子的光谱. Ziurys 等报道了一些含轻元素的碳化物双原子分子的纯转动光谱^[16,17],测量了它们的转动和超精细结构参数.

到目前为止,对含轻元素的碳化物双原子分子的报道相对要少一些. AlC 和 SiC 是比较重要的含轻元素的碳化物双原子分子.近年来,有关 AlC 和 SiC 分子的研究成果不断发表. Brazier^[18]和 Thoma 等^[19]实验研究了 AlC 分子的 $B^4\Sigma^- - X^4\Sigma^-$ 的光谱. Bauschlicher 等^[20]采用 MRCI 和 CASSCF 方法,研究了 AlC 分子的低双重态和四重态的光谱.基于 MRSOCI(Multi-Reference Second-Order Con-

figuration Interaction)方法的理论预言, Bernath 等^[21]从理论和实验两方面研究了 SiC 分子,计算了部分电子态的光谱参数 ω_e , r_e 和 T_e 的值. Ebben 等^[22]和 Butenhoff^[23]等实验研究了 SiC 分子 $C^3\Pi - X^3\Pi$ 跃迁的激光诱导荧光光谱.但关于 AlC 和 SiC 分子基态的解析势能函数和光谱参数还没有详细的理论工作报告.

本文从量子力学原理出发,应用 Gaussian 03 程序,选用不同的基组对 AlC、SiC 分子基态进行了量子力学计算,优化其平衡结构.并优选 QCISD(T)/6-311++G(3df,3pd)方法,对 AlC、SiC 分子的基态势能面进行了单点能扫描,拟合出其基态的 Murrell-Sorbie 势能函数,并在此基础上得到了其光谱参数.同时根据原子分子反应静力学原理和群论规则^[24,25],确定了 AlC 和 SiC 分子基态的正确离解极限和离解能.

2 AlC、SiC 分子基态的离解极限

由文献[18]和优化计算知, AlC 分子的基电子态为 $X^4\Sigma^-$. 由文献[21]知, SiC 分子的基电子态为 $X^3\Pi$. 分子势能函数对应一定的电子状态,为了准确表达对应电子状态的势能函数,必须确定正确的离解极限.根据原子分子反应静力学中的分离原子法^[24],能确定可能的电子状态和离解极限. C 和 Al、Si 的基态电子状态分别为 3P_g , 2P_u 和 3P_g , 均属于 SU(n)群,生成的 AlC、SiC 分子均属于 $C_{\infty v}$ 群. SU(n)群的不可约表示可以分解为 $C_{\infty v}$ 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,即所形成分子的可能电子状态. C (3P_g)、Al(2P_u)和 Si(3P_g)分别分解为 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示的直和为:

$$^3P_g = ^3\Sigma^- \oplus ^3\Pi$$

$$^2P_u = ^2\Sigma^+ \oplus ^2\Pi$$

$$^3P_g = ^3\Sigma^- \oplus ^3\Pi$$

根据分子电子状态的构造原理,可以推导出 AlC、SiC 分子的可能的电子状态.组合 $^2P_u + ^3P_g$ 和组合 $^3P_g + ^3P_g$ 的直积分别为:

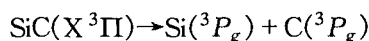
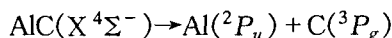
$$(^2\Sigma^+ \oplus ^2\Pi) \otimes (^3\Sigma^- \oplus ^3\Pi)$$

$$= ^{2,4}\Sigma^+ \oplus ^{2,4}\Sigma^- \oplus ^{2,4}\Pi \oplus ^{2,4}\Delta$$

$$(^3\Sigma^- \oplus ^3\Pi) \otimes (^3\Sigma^- \oplus ^3\Pi)$$

$$= 1,3,5 \Sigma^+ (2) \oplus 1,3,5 \Sigma^- \oplus 1,3,5 \Pi (2) \oplus 1,3,5 \Delta$$

容易看出结果中分别含有 AlC 分子的 $^4\Sigma^-$ 态和 SiC 分子的 $^3\Pi$ 态. 因此从 $C(^3P_g)$ 、 $Al(^2P_u)$ 和 $Si(^3P_g)$ 基态原子的组合可以得到 AlC、SiC 分子的基态. 由原子分子反应热力学的微观过程的可逆性原理, 则 AlC、SiC 分子的基电子状态的离解极限分别为



3 AlC、SiC 分子的基态势能函数和光谱参数的量子力学计算

AlC 分子的基态电子组态是 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\Pi^4 4\sigma^2 5\sigma^2 6\sigma^2 7\sigma^1 2\Pi^2$, SiC 分子的基态电子组态是 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\Pi^4 4\sigma^2 5\sigma^2 6\sigma^2 7\sigma^1 2\Pi^3$. 可见 AlC 分子的外层未填满组态为 $\Pi^2\sigma$, SiC 分子的外层未填满组态为 $\Pi^3\sigma$, 组态 $\Pi^2\sigma$ 可能形成的谱项为 $^2\Sigma^+$ 、 $^2\Sigma^-$ 、 $^2\Delta$ 、 $^4\Sigma^-$, 其中 $^4\Sigma^-$ 为基电子态. 组态 $\Pi^3\sigma$ 可能形成的谱项为 $^1\Pi$ 、 $^3\Pi$, 其中 $^3\Pi$ 为基电子态. AlC 和 SiC 分子外层均存在未添满的 σ 、 Π 电子壳层, 故需要考虑电子相关效应. 采用密度泛函理论中的 B3LYP 方法和同时考虑了单、双、三取代的组态相互作用修正的 QCISD(T) 方法, 选择 6-31G(d, ρ)、6-311G++(2df, 2pd)、6-311G++(3df, 3pd)、cc-PVTZ、aug-cc-PVTZ 基组分别对 AlC 和 SiC 分子的基态进行了几何优化和谐振频率分析, 所得结果如表 1~表 4 所示. 通过综合分析表 1~表 4, 我们发现, 对 AlC 和 SiC 分子, 采用 QCISD(T)/6-311++G(3df, 3pd) 方法的计算结果与实验值^[18,23]较为接近. 故在几何优化和频率计算完

成后, 我们采用 QCISD(T)/6-311++G(3df, 3pd) 方法分别对 AlC 和 SiC 分子的基态进行单点能扫描计算. 扫描过程中使用的各种参数除两原子之间的距离在不断变化外, 其它参数均与结构优化时保持严格一致. 当得到 AlC($X^4\Sigma^-$) 和 SiC($X^3\Pi$) 的一系列单点势能值之后, 用最小二乘法拟合到 Murrell-Sorbie 函数^[25]:

$$V = -De(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho)$$

式中 $\rho = r - R_e$, r 和 R_e 分别为核间距和平衡核间距. D_e , a_1 , a_2 , a_3 为拟合系数, 借助这些系数可以计算出各阶力常数, AlC 和 SiC 分子基态的拟合计算结果列在表 5 中. Murrell-Sorbie 势能函数的系数与各阶力常数的关系如下^[25]:

$$f_2 = D_e(a_1^2 - 2a_2)$$

$$f_3 = 6D_e(a_1a_2 - a_3 - a_1^3/3)$$

$$f_4 = D_e(3a_1^4 - 12a_1^2a_2 + 24a_1a_3)$$

f_2, f_3, f_4 分别为二阶, 三阶和四阶力常数, 根据拟合得到的完整势能函数, 使用以下公式可以计算光谱参数^[25]:

$$B_e = \frac{h}{8\pi^2 ucR_e^2}$$

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

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

$$\omega_e = \sqrt{\frac{f_2}{4\pi^2 uc^2}}$$

式中, B_e 和 α_e 分别为平衡转动常数和振动-转动耦合常数, $\omega_e \chi_e$ 和 ω_e 分别为非谐性频率和谐性频率, u 为分子的约化质量, C 为光速. 理论计算光谱参数结果与实验结果对比见表 6 和表 7.

表 1 采用 B3LYP 方法对 AlC 分子基态的优化计算结果

Table 1 Optimization calculations of the ground state of AlC using B3LYP

Basis set	R_e /nm	ω_e /cm ⁻¹	D_e /eV	u /Debye	E /Hartree
6-31G(d, ρ)	0.19746	632.2283	3.322	1.3932	-280.3351619
6-311++G(2df, 2pd)	0.19715	626.2755	3.397	2.0278	-280.3675746
6-311++G(3df, 3pd)	0.197	626.2337	3.407	2.0139	-280.3679804
cc-PVTZ	0.19764	623.9721	3.380	1.9041	-280.3709053
aug-cc-PVTZ	0.19762	622.1868	3.384	2.0170	-280.3717925
Exp ^[18]	0.1955	654			

表2 采用 QCISD(T)方法对 AIC 分子基态的优化计算结果

Table 2 Optimization calculations of the ground state of AIC using QCISD(T)

Basis set	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	D_e/eV	u/Debye	$E/\text{Hartree}$
6-31G(<i>d, p</i>)	0.19673	666.7843	3.182	0.6752	-279.7695699
6-311 + +G(2 <i>df, 2pd</i>)	0.19733	643.3501	3.353	1.0724	-279.8258337
6-311 + +G(3 <i>df, 3pd</i>)	0.19684	648.9904	3.378	1.0339	-279.8279047
cc-PVTZ	0.19782	644.8360	3.326	1.0384	-279.8328043
aug-cc-PVTZ	0.19806	639.0100	3.357	1.1049	-279.8353352
Exp ^[18]	0.1955	654			

表3 采用 B3LYP方法对 SiC 分子基态的优化计算结果

Table 3 Optimization calculations of the ground state of SiC using B3LYP

Basis set	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	D_e/eV	u/Debye	$E/\text{Hartree}$
6-31G(<i>d, p</i>)	0.17236	971.1726	4.257	1.1957	-327.3722404
6-311 + +G(2 <i>df, 2pd</i>)	0.17154	980.7659	4.383	1.7642	-327.4107510
6-311 + +G(3 <i>df, 3pd</i>)	0.17132	984.6761	4.403	1.7668	-327.4115134
cc-PVTZ	0.17194	978.6283	4.352	1.6734	-327.4126308
aug-cc-PVTZ	0.17197	976.5757	4.349	1.7560	-327.4134156
Exp ^[23]	0.17182	965.16			

表4 采用 QCISD(T)方法对 SiC 分子基态的优化计算结果

Table 4 Optimization calculations of the ground state of SiC using QCISD(T)

Basis set	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	D_e/eV	u/Debye	$E/\text{Hartree}$
6-31G(<i>d, p</i>)	0.17322	972.2360	3.972	0.2295	-326.7856846
6-311 + +G(2 <i>df, 2pd</i>)	0.17250	977.4873	4.215	0.5512	-326.8585411
6-311 + +G(3 <i>df, 3pd</i>)	0.17226	983.2429	4.258	0.5641	-326.8615902
cc-PVTZ	0.17306	974.5454	4.171	0.5205	-326.8649998
aug-cc-PVTZ	0.17325	968.8107	4.218	0.5638	-326.8685165
Exp ^[23]	0.17182	965.16			

表5 AIC($X^4\Sigma^-$)、SiC($X^3\Pi$)分子的基态的 Murrell-Sorbie 势能函数Table 5 Murrell-Sorbie potential energy function of the ground state of AIC ($X^4\Sigma^-$) and SiC($X^3\Pi$)

States	D_e /eV	a_1 /nm ⁻¹	a_2 /nm ⁻²	a_3 /nm ⁻³	f_2 /10 ⁻¹⁶ J·nm ⁻²	f_3 /10 ⁻¹⁵ J·nm ⁻³	f_4 /10 ⁻¹⁴ J·nm ⁻⁴
$X^4\Sigma^-$	3.373	27.524	196.162	1174.38	1.971	-8.826	38.546
$X^3\Pi$	4.287	39.09	409.408	1867.267	4.865	-23.762	85.696

表6 AIC($X^4\Sigma^-$)分子基态的光谱参数Table 6 Spectroscopy parameters of the ground state of AIC($X^4\Sigma^-$)

Molecule	States	B_e/cm^{-1}	a_e/cm^{-1}	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e x_e/\text{cm}^{-1}$
AIC	$X^4\Sigma^-$	0.524	5.03×10^{-3}	634.55	3.518
Exp ^[19]				639.3	4.5
Exp ^[18]		0.531	5.1×10^{-3}	654.836	4.2933

表7 SiC($X^3\Pi$)分子的基态的光谱参数Table 7 Spectroscopy parameters of the ground state of SiC($X^3\Pi$)

Molecule	States	B_e/cm^{-1}	a_e/cm^{-1}	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e x_e/\text{cm}^{-1}$
SiC	$X^3\Pi$	0.676	5.0×10^{-3}	990.674	5.55
Exp ^[22]				964.6	5.6
Exp ^[23]		0.67976	5.38×10^{-3}	965.16	5.91

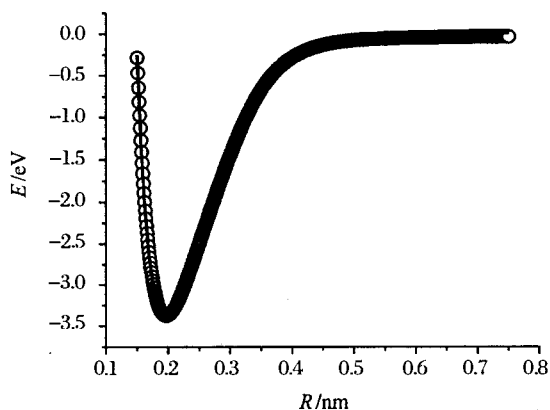


图1 AlC分子基态的势能曲线

Fig.1 Potential energy curves for the ground state of AlC

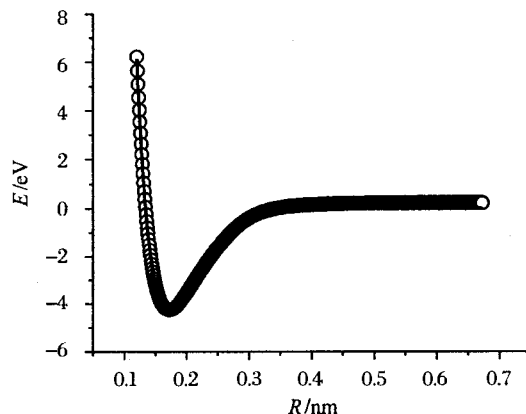


图2 SiC分子基态的势能曲线

Fig.2 Potential energy curves for the ground state of SiC

图1、图2分别给出了AlC、SiC分子基态的势能曲线,图中的离散圆圈为理论计算势能值,实线为拟合势能曲线,由图可以看到,扫描得到的势能曲线与拟合曲线符合的很好,这说明Murrell-Sorbie势能函数能正确反映AlC、SiC分子基态的势能函数。

4 结 语

本工作利用原子分子反应静力学的原理,导出了AlC分子和SiC分子基态的合理的离解极限和离解能.分别用B3LYP和QCISD(T)方法对两分子进行了结构优化和谐振频率分析,并利用优选出来的QCISD(T)/6-311++G(3df,3pd)方法对两分子进行了单点能的扫描计算,且拟合出了Murrell-Sorbie势能函数.同时将理论计算得到的光谱数据与实验光谱数据进行了比较,结果表明,两者吻合的较好。

致 谢 感谢四川大学原子分子物理研究所高涛老师在论文写作过程中给予的指导和帮助!

参考文献:

[1] Li Q, Zhu Z H. Structure and potential energy function of CH, NH and OH free radical ground and low-lying

states [J]. *Acta. Phys. Sin.*, 2006, 55: 102 (in Chinese) [李权, 朱正和. CH, NH 和 OH 自由基基态与低激发态分子结构与势能函数 [J]. *物理学报*, 2006, 55: 102]

- [2] Gao T, Tang Y J, Wang H Y, *et al.* Analytical potential energy function for the electronic states $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ and $B^3\Pi_g$ of N_2 molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 1998, 15: 329 (in Chinese) [高涛, 唐永建, 王红艳, 等. N_2 分子 $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ 和 $B^3\Pi_g$ 的势能函数 [J]. *原子与分子物理学报*, 1998, 15: 329]
- [3] Li Y X, Gao T, Zhu Z H, *et al.* Molecular structure and relativistic effective core potential for the ground and low-lying excited states of PuN [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22: 305 (in Chinese) [李跃勋, 高涛, 朱正和, 等. PuN 基态和低激发态的分子结构与相对论有效原子实势 [J]. *原子与分子物理学报*, 2005, 22: 305]
- [4] Mao H P, Yang L R, Zhu Z H. Structure and potential energy function of AuY and Au₂Y molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22: 337 (in Chinese) [毛华平, 杨兰蓉, 朱正和. AuY, Au₂Y 分子的结构和势能函数 [J]. *原子与分子物理学报*, 2005, 22: 337]
- [5] Yan Z X, Xie A D, Wu J H, *et al.* The structure and analytical potential energy function for AlH molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22: 375 (in Chinese) [炎正馨, 谢安东, 吴旌贺, 等. AlH 分子结构与分析势

- 能函数[J]. 原子与分子物理学报, 2005, 22: 375]
- [6] Wang H Y, Gao T, Zhu Z H, *et al.* The quantum mechanical calculation of the ground state $X^3\Pi$ for UC [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2000, 17: 17 (in Chinese) [王红艳, 高涛, 朱正和, 等. UC 分子基态 $^3\Pi$ 的量子力学计算[J]. 原子与分子物理学报, 2000, 17: 17]
- [7] Fan X H, Wang Z G, Yan B, *et al.* Theoretical study on electronic state structure and stability of EuC molecule [J]. *J. At. Mol. Phys.*, 2005, 22: 439 (in Chinese) [范鲜红, 王志刚, 闫冰, 等. EuC 分子的电子态结构和稳定性理论研究[J]. 原子与分子物理学报, 2005, 22: 439]
- [8] Li G, Sun Y, Wang X L, *et al.* Molecule structures and potential energy function for PuC and PuC₂ molecule [J]. *Acta Phys. Chim. Sin.*, 2003, 19: 356 (in Chinese) [李赣, 孙颖, 汪小琳. PuC 和 PuC₂ 的分子结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2003, 19: 356]
- [9] Zhu Z H, Wang R. The characteristics of doubly and triply charged ions C₂⁺, C₂⁻ and C₂³⁺ [J]. *Chin. Phys.*, 2003, 12: 1218
- [10] Balfour W J, Cao J Y, Prasad C V V, *et al.* Electronic spectroscopy of jet-cooled iron monocarbide. The $^3\Delta_i - ^3\Delta_i$ transition near 493 nm [J]. *J. Chem. Phys.*, 1995, 103: 4046
- [11] Steimle T C, Jung K Y, Li B Z. The permanent electric dipole moment of PtO, PtS, PtN, and PtC [J]. *J. Chem. Phys.*, 1995, 103: 1767
- [12] Marr A J, Flores M E, Steimle T C. The optical and optical/Stark spectrum of iridium monocarbide and mononitride [J]. *J. Chem. Phys.*, 1996, 104: 8183
- [13] Langenberg J D, DaBell R S, Lian S, *et al.* Resonant two-photon ionization spectroscopy of jet-cooled RuC [J]. *J. Chem. Phys.*, 1998, 109: 7863
- [14] Langenberg J D, Shao L, Morse M D. Resonant two-photon ionization spectroscopy of jet-cooled PdC [J]. *J. Chem. Phys.*, 1999, 111: 4077
- [15] Brugh D J, Morse M D. Resonant two-photon ionization spectroscopy of NiC [J]. *J. Chem. Phys.*, 2002, 117: 10703
- [16] Xin J, Ziurys L M. Gas phase spectroscopy of alkali carbides: the pure rotational spectrum of KC($X^4\Sigma^-$) [J]. *J. Chem. Phys.*, 1999, 110: 4797
- [17] Sheridan P M, Xin J, Ziurys L M. The pure rotational spectrum of NaC in its $X^4\Sigma^-$ state: observation and interpretation [J]. *J. Chem. Phys.*, 2002, 116: 5544
- [18] Brazier C R. First gas phase spectrum of the aluminum carbide molecule: the B $^4\Sigma^- - X^4\Sigma^-$ system [J]. *J. Chem. Phys.*, 1993, 98: 2790
- [19] Thoma A, Caspary N, Wurful B E, *et al.* Visible absorption and fluorescence of AlC, B $^4\Sigma^- - X^4\Sigma^-$, in solid argon [J]. *J. Chem. Phys.*, 1993, 98: 8458
- [20] Bauschlicher Jr C W, Langhoff S R, Pettersson L G M. The computed spectrum of AlC [J]. *J. Chem. Phys.*, 1988, 89: 5747
- [21] Bernath P F, Rogers S A, O'Brien L C, *et al.* Theoretical predictions and experimental detection of the SiC molecule [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 60: 197
- [22] Ebben M, Drabbels M, ter Meulen J J. The C³ $\Pi(V' = 0 \sim 6) - X^3\Pi(V'' = 0)$ transition in SiC [J]. *J. Chem. Phys.*, 1991, 95: 2292
- [23] Butenhoff T J, Rohlfing E A. The C³ $\Pi - X^3\Pi$ band system of the SiC radical [J]. *J. Chem. Phys.*, 1991, 95: 3939
- [24] Zhu Z H. *Atomic and molecular reaction statics* [M]. Beijing: Science Press, 1997 (in Chinese) [朱正和. 原子分子反应静力学[M]. 北京: 科学出版社, 1997]
- [25] Zhu Z H, Yu H G. *Molecular structure and potential energy functions* [M]. Beijing: Science Press, 1997 (in Chinese) [朱正和, 俞华根. 分子结构与分子势能函数[M]. 北京: 科学出版社, 1997]