

## Xe-N<sub>2</sub>O 复合物的分子间势能面和振转光谱的理论研究

陈军宪<sup>a</sup> 朱 华<sup>a</sup> 谢代前<sup>\*, a, b</sup> 鄢国森<sup>a\*</sup>

(<sup>a</sup> 四川大学化学学院 成都 610064)

(<sup>b</sup> 南京大学理论与计算化学研究所 化学系 南京 210093)

**摘要** 采用 CCSD(T) 方法研究了范德华分子体系 Xe-N<sub>2</sub>O 复合物的势能面和振转光谱性质. 研究表明, 该势能面有两个极小点, 分别对应 T 构型和线性 Xe-ONN 构型. 采用离散变量表象和 Lanczos 算法计算了体系的振转能级. 计算结果表明, CCSD(T) 势能面支持 97 个振动束缚态, 并对能级进行了指认. 计算得到的 Xe-N<sub>2</sub>O 转动跃迁频率与实验值吻合得很好.

**关键词** Xe-N<sub>2</sub>O, 势能面, 振转能级, 跃迁频率

## Ab initio Potential Energy Surface and Rovibrational Spectra of Xe-N<sub>2</sub>O

CHEN, Jun-Xian<sup>a</sup> ZHU, Hua<sup>a</sup> XIE, Dai-Qian<sup>\*, a, b</sup> Yan, Guo-Sen<sup>a</sup>

(<sup>a</sup> Department of Chemistry, Sichuan University, Chengdu 610064)

(<sup>b</sup> Institute of Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, Nanjing University, Nanjing 210093)

**Abstract** The intermolecular potential energy surface of Xe-N<sub>2</sub>O has been calculated at CCSD(T) level with the AREP basis set for Xe and cc-pVTZ basis set for N and O. Two local potential minima were found to be located at the T-shaped Xe-N<sub>2</sub>O and linear Xe-ONN geometries. The rovibrational energy levels were obtained in the Jacobi coordinates using the Lanczos algorithm and discrete variable representation. The calculated results show that the CCSD(T) potential supports 97 vibrational bound states of Xe-N<sub>2</sub>O complexes. The calculated rotational transition frequencies were very close to the observed values.

**Keywords** Xe-N<sub>2</sub>O, potential energy surface, rovibrational energy level, transition frequency

N<sub>2</sub>O 是重要的大气分子, 它与稀有气体原子(Rg)间的分子间弱相互作用是近年来备受关注的课题. Rg-N<sub>2</sub>O 是典型的具有大角度各向异性的 vdW 体系, 其中对 Ar-N<sub>2</sub>O 的研究不管在实验方面还是在理论方面都很广泛<sup>[1]</sup>. 1998 年, Herrebout 等<sup>[2]</sup>采用高分辨率的二级管激光吸收光谱技术观测了 vdW 分子 Ne-N<sub>2</sub>O, Kr-N<sub>2</sub>O 和 Xe-N<sub>2</sub>O 的基态及单体 N<sub>2</sub>O 处于 <sub>3</sub> 激发态下的红外光谱, 并进一步确定了 3 个 vdW 分子基态和激发态的转动常数. 研究结果表明, 上述 3 个分子都具有类似于 Ar-N<sub>2</sub>O 的 T 形构型. 我们已对 Ne-N<sub>2</sub>O 和 He-N<sub>2</sub>O 进行了理论研究<sup>[3,4]</sup>. 为了更有效地从理论上研究 Xe-N<sub>2</sub>O 体系的光谱动力学性质, 本文通过高精度量子化学从头算计算得到该分子的分子间势能面, 然后通过精确求解核运动方程获取分子的振转信息.

### 1 计算方法

在体系势能面的计算中采用 Jacobi 坐标 ( $R$ ,  $\theta$ ) 来描述分子间的几何构型, 其中  $R$  为 Xe 原子到 N<sub>2</sub>O 分子质心的距离,  $\theta$  为  $R$  和 N<sub>2</sub>O 分子轴间的夹角,  $\theta = 0^\circ$  对应于 Xe-ONN 线性构型. 计算过程中对 N<sub>2</sub>O 采用冻核近似, 其构型固定为平衡线性结构<sup>[5]</sup>:  $r(\text{N}-\text{N}) = 0.11273 \text{ nm}$ ,  $r(\text{N}-\text{O}) = 0.11851 \text{ nm}$ .

本文中, 我们采用三重激发校正的耦合簇 CCSD(T) 方法对从头算势能面进行计算, 其中对 Xe 选择 Lajohn 和 Christiansen<sup>[6]</sup>的具有 18 个价电子不收缩的 (5s5p4d) 有效势基组, 对 O 和 N 原子则选择 Dunning<sup>[7]</sup>的 cc-pVTZ 基组, 同时引入 3s3p2d 非收缩 Gaussian 函数<sup>[8]</sup> (3s 和 3p:  $\alpha = 0.9, 0.3$ ,

\* E-mail: dqxie@nju.edu.cn; Fax: 025-3596131

Received June 12, 2003; revised and accepted August 18, 2003.

国家自然科学基金(No. 20173036)、高校优秀青年教师奖和南京大学引进人才启动基金资助项目.

0.1; 2d: = 0.6, 0.2) 作为键函数, 键函数的中心位于原子与分子质心距离  $R$  的中点. 使用键函数可有效地减少高角动量极化函数的数目, 从而大大提高计算的效率.

本文采用超分子方法计算 Xe-N<sub>2</sub>O 体系的势能面. 分子间作用力定义为

$$V_{\text{int}} = V_{\text{Xe-N}_2\text{O}} - (V_{\text{Xe}} + V_{\text{N}_2\text{O}}) \quad (1)$$

为了消除基组重叠误差 (BSSE), 目前通常采用 Boys 和 Bernadi<sup>[9]</sup> 提出的 Counterpoise (CP) 方法. 对从头算得到的离散点采用如下解析表达式进行拟合:

$$V(R, \theta) = [A_0(\theta) + RA_1(\theta)] \exp(-R) + \sum_{n=6}^8 C_n(\theta) D_n(R, \theta) R^{-n} \quad (2)$$

式中  $D_n(R, \theta)$  为 Tang-Toennies 型的阻尼函数<sup>[10]</sup>

$$D_n(R, \theta) = 1 - \exp(-R) \sum_{m=0}^n [(R)^m / m!] \quad (3)$$

系数  $A_0, A_1, C_6, C_7, C_8$  均与角度  $\theta$  有关, 通常将其用 Legendre 多项式展开:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^9 f_l P_l(\cos \theta) \quad (4)$$

本文的所有从头算计算均采用 Gaussian 98 软件包<sup>[11]</sup>. 在 Born-Oppenheimer 近似下, Xe-N<sub>2</sub>O 体系的振转 Hamilton 算符表达为<sup>[12]</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{H}(R, \theta, \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \left( \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} + \frac{\hbar^2}{2I} \right) \cdot \\ & \left[ -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{J}_z^2}{\sin^2 \theta} \right] + \frac{1}{2\mu R^2} (\hat{J}^2 - 2\hat{J}_z^2) + \\ & \frac{\cot \theta}{2\mu R^2} \cdot \hat{J}_z I (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) + (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) I + \frac{\hbar}{2\mu R^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \\ & I (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) I + V(R, \theta) \end{aligned} \quad (5)$$

式中,  $\mu$  是约化质量,  $I$  是线性分子的转动惯量. 本文采用离散变量 (DVR) 表象方法<sup>[13]</sup> 求解体系振转方程, 其中对径向伸缩振动采用 sine-DVR 函数集作为基函数, 对弯曲振动采用归一化的联属 Legendre 函数作为基函数. 采用 Lanczos<sup>[14,15]</sup> 传播方法对角化所得的振转 Hamilton 矩阵, 从而得到体系的振转能级和波函数.

## 2 结果与讨论

### 2.1 Xe-N<sub>2</sub>O 的从头算势能面

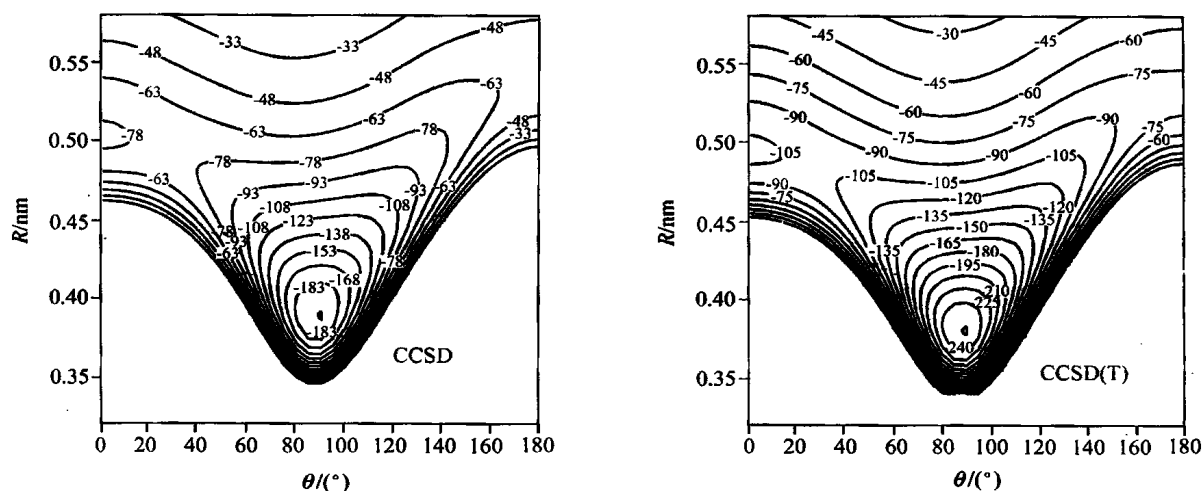
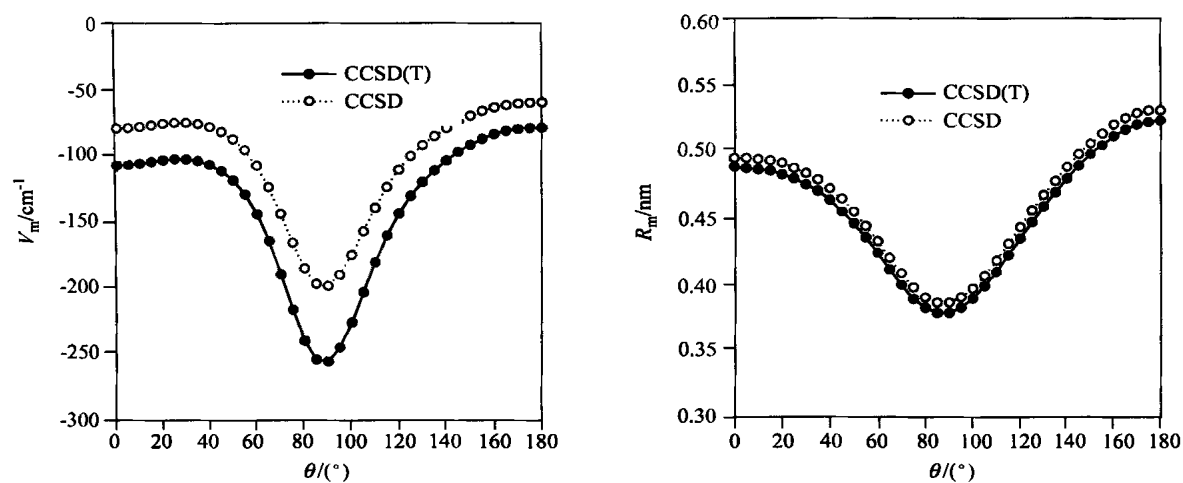
在 CCSD(T) 计算中,  $\theta$  的取值范围从 0°~180°, 间隔为 10° 或 15° 共 15 个角度, 对每个角度  $R$  从 0.3~1.0 nm 取 10~

15 个值共 216 个单点构型做了能量计算, 并进行了势能面的拟合. 对 CCSD 和 CCSD(T) 势能值拟合的均方根差分别为 0.37 和 0.36 cm<sup>-1</sup>. 图 1 绘出了拟合后得到的 CCSD 和 CCSD(T) 势能面的二维等势曲线. 从图中可以看出, 这两个势能面在全程范围内非常相似, 具有很强的角度各向异性, 均有两个极小值分别对应 T 形构型及线性 He-ONN 构型. 在 CCSD 势能面上, 第一极小值为 T 形构型, 对应的  $\theta = 88.1^\circ$ ,  $R_m = 0.388$  nm,  $V_m = -199.06$  cm<sup>-1</sup>; 线性极小值为  $\theta = 0^\circ$ ,  $R_m = 0.502$  nm,  $V_m = -79.74$  cm<sup>-1</sup>. 两个极小值中的鞍点的几何构型为  $\theta = 27.4^\circ$ ,  $R_m = 0.492$  nm,  $V_m = -75.21$  cm<sup>-1</sup>. 在 CCSD(T) 势能面上, 第一极小值也为 T 形构型, 对应的  $\theta = 88.0^\circ$ ,  $R_m = 0.380$  nm,  $V_m = -256.51$  cm<sup>-1</sup>; 线性极小值为  $\theta = 0^\circ$ ,  $R_m = 0.495$  nm,  $V_m = -107.57$  cm<sup>-1</sup>. 在 CCSD(T) 势能面两个极小值间存在一个鞍点, 其几何结构为  $\theta = 27.6^\circ$  和  $R_m = 0.484$  nm, 势能为 -102.75 cm<sup>-1</sup>. 鞍点相对于第一极小值点的能垒高度为 148.94 cm<sup>-1</sup>, 相对于第二极小值点的能垒高度为 4.72 cm<sup>-1</sup>. 从以上的数据看出, 两种势能面的特性基本一致, 并且第一极小值与实验值吻合得较好, 实验光谱<sup>[2]</sup>得到的极值构型为  $\theta = 82.99^\circ$ ,  $R_m = 0.37806$  nm,  $V_m = -213.21$  cm<sup>-1</sup>. 这说明 CCSD(T) 方法计算 Xe-N<sub>2</sub>O 体系的分子间作用力具有较好的收敛性. 在下面对 Xe-N<sub>2</sub>O 振转光谱的分析中我们则采用 CCSD(T) 势能面. 图 2 绘出了各角度下 CCSD 和 CCSD(T) 的势能极小值  $V_m$  以及相应的  $R_m$  和  $\theta$  的关系. 从图中可以看出, CCSD 和 CCSD(T) 方法下得到的曲线图基本一致; 另外, 在不同方向上势能极小值所对应的  $R_m$  有很大差别: 比如对 CCSD(T) 势能面, 从 0°~88.0°,  $R_m$  随  $\theta$  的增大而减小, 从 0.495 nm 减小到 0.381 nm, 而从 88.0°~180°,  $R_m$  随  $\theta$  的增大而增大, 从 0.381 nm 增加到 0.531 nm, 这表明体系的势能面具有很强的角度-径向耦合作用.

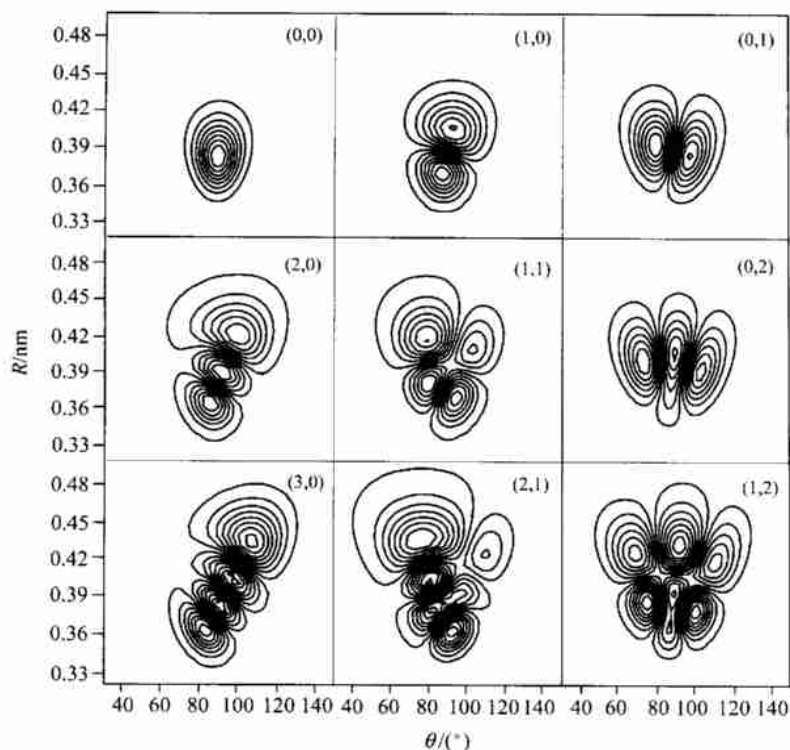
### 2.2 振动能级

我们首先对键伸缩振动在 0.2~1.2 nm 范围选择 120 个 Sine-DVR 格点, 对弯曲振动在 0°~180° 之间选择 90 个 Gaussian-Legendre 格点, 并取 Lanczos 递推步数为 7000, 以保证结果的收敛性. 通过改变格点数目及递推步数进行收敛性验证, 最终收敛度保持在 0.001 cm<sup>-1</sup> 以内.

表 1 列出了用 DVR 方法计算得到的 Xe-N<sub>2</sub>O 体系振动能级, 其中量子数  $n, j$  分别表示伸缩振动和弯曲振动量子数. 振动能级相应的量子数是根据波函数的节点结构来确定的. 计算表明, CCSD(T) 势能面支持 97 个振动束缚态, 表 1 仅列出了已指认出的 27 个能级. Xe-N<sub>2</sub>O 的振动基态能级为 -219.94 cm<sup>-1</sup>, 而势能面第一极小值为 -256.51 cm<sup>-1</sup>, 得到零点能为 46.57 cm<sup>-1</sup>, 零点能不足能垒高度 (148.94 cm<sup>-1</sup>) 的三分之一, 这意味着 Xe-N<sub>2</sub>O 分子的振动基态和低激发态均定域在第一极小值附近. 图 3 绘出了 Xe-N<sub>2</sub>O 的前 9 个振动能级的波函数. 第 1, 2 和 6 激发态对应的是伸缩振动态 (1, 0), (2, 0) 和 (3, 0), 伸缩振动的基频为 31.16 cm<sup>-1</sup>; 第 2 和 5 激发态对应的是弯曲振动态 (0, 1) 和 (0, 2), 弯曲振动的基频为 35.63 cm<sup>-1</sup>.

图1 Xe-N<sub>2</sub>O 的 CCSD 和 CCSD(T) 势能面Figure 1 Contour plots of the CCSD and CCSD(T) potentials of Xe-N<sub>2</sub>O (contours are labelled in cm<sup>-1</sup>)图2 Xe-N<sub>2</sub>O 在不同角度下的极小作用能  $V_m$  和相应的距离  $R_m$ Figure 2 Minimum interaction energy  $V_m$  and minimum energy distance  $R_m$  of Xe-N<sub>2</sub>O for  $\theta = 0^\circ \sim 180^\circ$ 表1 Xe-N<sub>2</sub>O 分子 CCSD(T) 势能面的振动能级 (cm<sup>-1</sup>)Table 1 Vibrational energy levels for Xe-N<sub>2</sub>O (cm<sup>-1</sup>) of the CCSD(T) potential

$n$	$j$		$n$	$j$		$n$	$j$	
0	0	- 219.94	4	0	- 116.77	3	2	- 83.91
1	0	- 188.78	0	4	- 109.81	2	3	- 79.92
0	1	- 184.31	2	2	- 106.69	2	4	- 77.51
2	0	- 160.96	1	3	- 101.31	3	3	- 76.87
1	1	- 156.72	3	1	- 100.00	3	4	- 72.28
0	2	- 151.10	1	4	- 94.43	4	3	- 71.74
3	0	- 136.93	0	5	- 93.08	6	1	- 70.15
2	1	- 131.69	4	2	- 89.16			
1	2	- 127.43895	5	1	- 88.733376			
0	3	- 120.84666	1	5	- 86.302174			

图3 Xe-N<sub>2</sub>O 的振动波函数Figure 3 Contour plots of wavefunctions for vibrational states of Xe-N<sub>2</sub>O

与 He-N<sub>2</sub>O 和 Ne-N<sub>2</sub>O 体系相比<sup>[3,4]</sup>, Xe-N<sub>2</sub>O 体系的情形有很大不同. 首先, 对 He-N<sub>2</sub>O 和 Ne-N<sub>2</sub>O 体系, 势能面更为平坦, 支持更少的振动束缚态, 分别为 5 和 28, 而 Xe-N<sub>2</sub>O 势能面具有较深的势阱, 支持较多的振动束缚态. 其次, He-N<sub>2</sub>O 和 Ne-N<sub>2</sub>O 的零点能分别为 36.57 cm<sup>-1</sup> 和 31.45 cm<sup>-1</sup>, 对应的能垒高度分别为 28.75 cm<sup>-1</sup> 和 57.19 cm<sup>-1</sup>. Ne-N<sub>2</sub>O 的零点能超过其能垒高度的一半, 使得振动第 2 激发态在第一和第二极小值间离域, He-N<sub>2</sub>O 的零点能超过能垒高度, 使得振动基态就具有明显的离域化特征. 而 Xe-N<sub>2</sub>O 体系相对于所对应的能垒具有较低的零点能, 使得其振动基态和低激发态都定域在 T 构型附近.

### 2.3 振转能级及跃迁频率

为了能与实验所观测到的光谱数据相比较, 我们进一步计算了 Xe-N<sub>2</sub>O 的振转能级和跃迁频率. 本文中, 我们同时计算了 Xe-N<sub>2</sub>O 中单体 N<sub>2</sub>O 处于基态和 <sub>3</sub> 激发态的 vdW 分子

的振转能级. 在计算过程中, 我们将单体 N<sub>2</sub>O 的 N—N 伸缩振动 <sub>3</sub> 标记为 vdW 分子 Xe-N<sub>2</sub>O 的 <sub>4</sub> 振动模式, 并将单体 N<sub>2</sub>O 的转动常数取为 0.41901109 cm<sup>-1</sup> 和 0.4155565 cm<sup>-1</sup><sup>[16]</sup> 来分别计算当 N<sub>2</sub>O 处于基态和 <sub>3</sub> 态时的 Xe-N<sub>2</sub>O 的 vdW 振转束缚态. 这里假设势能面不随 N<sub>2</sub>O 的振动态变化而变化, 同时进行了单体 N<sub>2</sub>O 处于 <sub>3</sub> 态时的质心偏移校正.

表 2 列出了采用从头算 CCSD(T) 势能面得到的部分跃迁频率, 其中  $J_{K_a K_c} - J_{K_a K_c}$  和  $J_{K_a K_c}$  分别表示 N<sub>2</sub>O 处于 <sub>3</sub> 态和振动基态时的 vdW 分子的振转束缚态,  $\text{calcd}$  为理论计算值,  $\text{calcd} - \text{obs}$  为计算值与实验值的差值, 计算值与实验值的均方根差为 0.073 cm<sup>-1</sup>. 理论计算与实验数据吻合得较好, 实验中一些纯转动跃迁具有相等的跃迁频率 (如 <sub>3</sub><sub>22</sub>-<sub>4</sub><sub>31</sub> 和 <sub>3</sub><sub>21</sub>-<sub>4</sub><sub>32</sub>) 等, 计算也得到了相同或相似的结果. 这些说明我们的从头算势能面具有较高的精度, 为进一步预测和研究该体系动力学性质提供了理论依据.

表 2 Xe-N<sub>2</sub>O 的跃迁频率及与实验值的差值 (cm<sup>-1</sup>)Table 2 Calculated frequencies (cm<sup>-1</sup>) from CCSD(T) potential and deviations from the observed values of Xe-N<sub>2</sub>O

$J_{K_a K_c} - J_{K_a K_c}$	calcd	calcd - obs	$J_{K_a K_c} - J_{K_a K_c}$	calcd	calcd - obs
<sub>5</sub> <sub>2 4</sub> - <sub>6</sub> <sub>3 3</sub>	- 2.439	- 0.053	<sub>5</sub> <sub>1 4</sub> - <sub>5</sub> <sub>0 5</sub>	0.340	- 0.070
<sub>5</sub> <sub>2 3</sub> - <sub>6</sub> <sub>3 4</sub>	- 2.439	- 0.053	<sub>6</sub> <sub>1 5</sub> - <sub>6</sub> <sub>0 6</sub>	0.349	- 0.070
<sub>4</sub> <sub>2 3</sub> - <sub>5</sub> <sub>3 2</sub>	- 2.373	- 0.056	<sub>7</sub> <sub>1 6</sub> - <sub>7</sub> <sub>0 7</sub>	0.359	- 0.071
<sub>4</sub> <sub>2 2</sub> - <sub>5</sub> <sub>3 3</sub>	- 2.373	- 0.056	<sub>8</sub> <sub>1 7</sub> - <sub>8</sub> <sub>0 8</sub>	0.370	- 0.071
<sub>3</sub> <sub>2 2</sub> - <sub>4</sub> <sub>3 1</sub>	- 2.307	- 0.060	<sub>1</sub> <sub>1 1</sub> - <sub>0</sub> <sub>0 0</sub>	0.385	- 0.070
<sub>3</sub> <sub>2 1</sub> - <sub>4</sub> <sub>3 2</sub>	- 2.307	- 0.060	<sub>9</sub> <sub>1 8</sub> - <sub>9</sub> <sub>0 9</sub>	0.384	- 0.072

续表

$J_{K_a K_c} - J_{K_a K_c}$	calcd	calcd - obs	$J_{K_a K_c} - J_{K_a K_c}$	calcd	calcd - obs
5 <sub>2,4</sub> -5 <sub>3,3</sub>	- 2.043	- 0.071	10 <sub>1,9</sub> -10 <sub>0,10</sub>	0.399	- 0.073
4 <sub>2,3</sub> -4 <sub>3,2</sub>	- 2.043	- 0.071	11 <sub>1,10</sub> -11 <sub>0,11</sub>	0.415	- 0.073
4 <sub>2,2</sub> -4 <sub>3,1</sub>	- 2.043	- 0.071	12 <sub>1,11</sub> -12 <sub>0,12</sub>	0.434	- 0.075
5 <sub>2,3</sub> -5 <sub>3,2</sub>	- 2.043	- 0.071	12 <sub>0,12</sub> -11 <sub>1,11</sub>	0.407	- 0.104
3 <sub>2,2</sub> -3 <sub>3,1</sub>	- 2.043	- 0.071	2 <sub>1,2</sub> -1 <sub>0,1</sub>	0.448	- 0.073
3 <sub>2,1</sub> -3 <sub>3,0</sub>	- 2.043	- 0.071	13 <sub>1,12</sub> -13 <sub>0,13</sub>	0.455	- 0.077
6 <sub>2,4</sub> -6 <sub>3,3</sub>	- 2.042	- 0.070	7 <sub>2,6</sub> -8 <sub>1,7</sub>	0.517	- 0.038
7 <sub>2,5</sub> -7 <sub>3,4</sub>	- 2.042	- 0.069	14 <sub>1,13</sub> -14 <sub>0,14</sub>	0.478	- 0.079
6 <sub>1,5</sub> -7 <sub>2,6</sub>	- 1.682	- 0.050	6 <sub>2,5</sub> -7 <sub>1,6</sub>	0.594	- 0.043
1 <sub>1,1</sub> -2 <sub>0,0</sub>	- 1.382	- 0.064	11 <sub>1,11</sub> -10 <sub>0,10</sub>	0.960	- 0.089
11 <sub>1,11</sub> -11 <sub>2,10</sub>	- 1.338	- 0.058	12 <sub>2,10</sub> -12 <sub>1,11</sub>	1.002	- 0.058
10 <sub>1,10</sub> -10 <sub>2,9</sub>	- 1.323	- 0.061	10 <sub>2,8</sub> -10 <sub>1,9</sub>	1.026	- 0.060
9 <sub>1,9</sub> -9 <sub>2,8</sub>	- 1.310	- 0.063	9 <sub>2,7</sub> -9 <sub>1,8</sub>	1.038	- 0.062
8 <sub>1,8</sub> -8 <sub>2,7</sub>	- 1.297	- 0.064	12 <sub>1,12</sub> -11 <sub>0,11</sub>	1.011	- 0.091
2 <sub>1,1</sub> -2 <sub>0,2</sub>	0.324	- 0.068	5 <sub>3,3</sub> -6 <sub>2,4</sub>	1.463	- 0.048
4 <sub>1,3</sub> -4 <sub>0,4</sub>	0.334	- 0.068	5 <sub>2,3</sub> -4 <sub>1,4</sub>	1.437	- 0.082

## References

- Horst, M. A. ; Jameson, C. J. *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 10238.
- Herrebout, W. A. ; Qian, H.-B. ; Yamaguchi, H. ; Howard, B. J. *J. Mol. Spectrosc.* **1998**, *189*, 235.
- Zhu, H. ; Xie, D.-Q. ; Yan, G.-S. *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *351*, 149.
- Zhu, H. ; Li, J. ; Xie, D.-Q. ; Yan, G.-S. *Chem. J. Chin. Univ.* **2002**, *23*, 2137 (in Chinese).  
(朱华, 李绛, 谢代前, 鄢国森, 高等学校化学学报, **2002**, *23*, 2137.)
- Teffo, J. L. ; Chedin, A. *J. Mol. Spectrosc.* **1989**, *135*, 389.
- Lajohm, L. A. ; Christiansen, P. A. ; Ross, R. B. ; Atashroo, T. ; Ermler, W. C. *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 2812.
- Woon, D. E. ; Dunning, T. H. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 1358.
- Tao, F.-M. ; Pan, Y.-K. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 4989.
- Boys, S. F. ; Bernadi, F. *Mol. Phys.* **1970**, *19*, 553.
- Tang, K.-T. ; Toennies, J. P. *J. Chem. Phys.* **1984**, *80*, 3726.
- Frisch, M. J. ; Trucks, G. W. ; Schlegel, H. B. ; Scuseria, G. E. ; Robb, M. A. ; Cheeseman, J. R. ; Zakrzewski, V. G. ; Montgomery Jr., J. A. ; Stratmann, R. E. ; Burant, J. C. ; Dapprich, S. ; Millam, J. M. ; Daniels, A. D. ; Kudin, K. N. ; Strain, M. C. ; Farkas, O. ; Tomasi, J. ; Barone, V. ; Cossi, M. ; Cammi, R. ; Mennucci, B. ; Pomelli, C. ; Adamo, C. ; Clifford, S. ; Ochterski, J. ; Petersson, G. A. ; Ayala, P. Y. ; Cui, Q. ; Morokuma, K. ; Malick, D. K. ; Rabuck, A. D. ; Raghavachari, K. ; Foresman, J. B. ; Cioslowski, J. ; Ortiz, J. V. ; Baboul, A. G. ; Stefanov, B. B. ; Liu, G. ; Liashenko, A. ; Piskorz, P. ; Komaromi, I. ; Gomperts, R. ; Martin, R. L. ; Fox, D. J. ; Keith, T. ; Al-Laham, M. A. ; Peng, C. Y. ; Nakayakara, A. ; Gonzalez, C. ; Challacombe, M. ; Gill, P. M. W. ; Johnson, B. ; Chen, W. ; Wong, M. W. ; Andres, J. L. ; Gonzales, C. ; Head-Gordon, M. ; Replogle, E. S. ; Pople, J. A. *Gaussian 98*, Revision A.7, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, **1998**.
- Miller, S. ; Tennyson, J. *J. Mol. Spectrosc.* **1988**, *128*, 132, 530.
- Choi, S. E. ; Light, J. C. *J. Chem. Phys.* **1990**, *92*, 2129.
- Cullum, J. ; Willoughby, R. A. *J. Comput. Phys.* **1981**, *44*, 329.
- Nauts, A. ; Wyatt, R. E. *Phys. Rev. Lett.* **1983**, *51*, 2238.
- Teffo, J.-L. ; Chedin, A. *J. Mol. Spectrosc.* **1989**, *135*, 389.

(A0306124 SHEN, H. ; LING, J.)