LEVEL 8.2 使用手册

——对径向薛定谔方程求解束缚和准束缚能级的计算机程序

Robert J. Le Roy
Guelph-Waterloo Centre for Graduate Work in Chemistry
University of Waterloo, Waterloo, Ontario N2L 3G1, Canada
电子邮箱：leroy@UWaterloo.ca

Zork　译
电子邮箱：qcband@gmail.com

2018 年 1 月 30 日

内 容 简 介

本手册讲述的 Level 程序可以对任何具有单、双极小点势函数的束缚或准束缚能级求解径向或一维薛定谔方程，并计算单个势函数或两个不同势函数的能级之间的惯性转动常数和离心畸变常数，期待值，Franck-Condon 因子，以及其它的非对角矩阵元。

Level 现已升级到 16 版（http://leroy.uwaterloo.ca/programs/），但是新版手册中砍掉了理论部分（已做为单独的论文发表，见 R. J. Le Roy, *LEVEL: A Computer Program for Solving the Radial Schrödinger Equation for Bound and Quasibound Levels*, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, 186, 167-178 (2017)）。因此中文使用手册基于 Level16 的上一个版本，即 2014 年 5 月 8 日的 8.2 版，但对原文中的个别笔误参考了 16 版手册。

杨新征博士在 2001 年左右参与了使用手册早期版本 7.4 版的翻译工作（未发布），在此表示感谢。

目　　录

第一章　简介 1

第二章　程序操作与选项的简述 3

2.1　求解径向薛定谔方程 3

2.2　定位准束缚能级并决定其宽度 6

2.3　计算双原子分子离心畸变常数 7

2.4　计算期待值，矩阵元和爱因斯坦系数 $\mathcal{A}$ 8

2.5　定义无转动的势函数 $V(r)$ 8

2.5.1　$Lennard-Jones$(m,n) 势函数 9

2.5.2　多项式势函数 9

2.5.3　“扩展的 Morse 振荡”或 EMO 势函数 9

2.5.4　“Morse/长程”或 MLR 势函数 10

2.5.5　“双指数长程”或 $DELR$ 势函数 11

2.5.6　广义 HFD 势函数 12

2.5.7　“X-展开”或者“Hannover 多项式”势函数（HPP） 12

2.6　Born-Oppenheimer 分解径向强度函数 13

第三章　单位，物理常数，数组维度，输入/输出习惯，与程序的执行 14

第四章　数据结构和输入参数的定义 16

4.1　输入文件数据的定义与说明 17

第五章　程序的升级 28

5.1　到 8.2 版（2014 年 5 月 8 日）的升级 28

致谢 29

参考文献 30

附录：程序的结构，输入范例，样本数据和输出文件，以及耗时 **33**
A. 程序的结构 33
B. 输入范例 34
C. 示例 1a)–1d) 的输入数据文件 36
D. 示例 1a)–1d) 的通道 6 输出文件 37
E. 示例 2a)–2e) 的输入文件 45
F. 示例 3 的输入文件 46
G. 示例 3 的通道 6 输出文件 47
H. 示例 3 的通道 8 输出文件 51

第一章　简介

对给定的一维或有效径向势函数，确定振-转能级的数量、能量及性质，并计算矩阵元，以及计算单个势函数的能级之间或两个不同势函数能级之间的跃迁强度，是化学物理中广泛存在的问题。下面我们将要介绍的是一个进行此类计算的强大灵活的计算程序。本程序的最初版本基于 R. N. Rare 著名的 Frank-Condon 强度计算程序 [1, 2, 3]，但目前的版本已经做了大量修改，并加入了一些独特的功能。特别是：

1. 可以自动定位并计算准束缚能级（或轨道共振、隧道预离解）的宽度；
2. 对于双原子分子给定势函数的能级，可以计算惯性转动常数和离心畸变常数；
3. 对于反对称双极小点势函数，通过任一势阱的主波函振幅，可以很方便地定位能级；
4. 可以自动定位和计算任何单个极小点、“平缓态（shelf state [1]）”、或双极小点势函数的所有振转能级的期待值；
5. 作为对 4 的扩展，程序可以在两个不同势函数的能级之间，或同一势函数的各能级之间，对所有符合（输入文件中）指定的转动选择定则的分立的可能跃迁，自动生成（例如）Frank-Condon 因子和辐射寿命。对于单重-单重电子跃迁，当前的版本利用 Hönl-London 因子产生指定的矩阵元，并计算爱因斯坦系数 A。这也可以进行推广，处理其它情况。

以下的第二章介绍了程序求解的基本方程，描述了程序的工作原理，并简述了一些选项。接下来的第三章介绍了输入输出的规则，给出了所用物理参数设定的单位，并介绍了在 UNIX 或 Linux 系统下运行本程序的 shell。程序由执行过程中（从通道 5）读取的数据文件的内容进行控制。数据文件的结构以及各个输入参数的意义将在第四章说明。第五章介绍本程序的当前版本（8.2）与以前版本 [4] 的主要区别。最后，附录简述了程序的结构以及各子程序的功能，给出了示范性的样本数据输入文件及其输出结果的列表。

Level 当前版本的（加入大量注释的）源代码和手册的 PDF 文件可以从网站http://leroy.uwaterloo.ca/programs/获得。虽然分发或使用本程序无需付费，但使用时应当在出版物中通

[1]类似于大陆架的势函数，即，能量位于平衡键长低能区（海洋）和离解极限高能区（陆地）之间，像大陆架的形状平缓的区域。——译注。

过引用报告 [5] 表示致谢。此外，我们要求用户不要自己分发此程序，而是让可能的用户访问上面的网站，或联系作者本人。这里讲述的版本包含了截止到 2014 年 2 月 1 日的修订和增强。使用本代码 [4] 旧版本的个人用户最好获取当前版本，因为包含了修订和新的功能。如果用户把这个代码存在的明显错误，不稳定性，或者想要在以后版本中添加的功能通知我，我会非常感谢。

第二章　程序操作与选项的简述

2.1　求解径向薛定谔方程

这个程序的核心是确定径向或（有效）一维薛定谔方程的离散特征值和特征函数：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\Psi_{v,J}(r)}{dr^2}+V_J(r)\Psi_{v,J}(r)=E_{v,J}\Psi_{v,J}(r) \tag{1}$$

其中 μ 是体系的有效质量或约化质量，J 是转动量子数，r 是核间距，有效一维势 $V_J(r)$ 是无转动的（电子）势函数 $V(r)$ 加上一个离心项。对于双原子分子三维旋转的简正问题，这个离心势的形式为 $[J(J+1)-\Omega^2]\hbar^2/2\mu r^2$，其中 $\Omega=$ OMEGA 是电子角动量到核间轴的投影。然而，对于双原子二维转动的特殊情况——通过设置读入参数OMEGA > 99 来调用（见第四章的数据输入声明 #5 的讨论），这一项变成 $[J^2-1/4]\hbar^2/2\mu r^2$。此外，为了包含分子离子的情况，程序还把方程（1）中的约化质量定义为 Watson 的“电荷修正约化质量”[6]，$\mu=\mu_W=(M_AM_B)/(M_A+M_B-m_eQ)$，其中 M_A 和 M_B 是两个原子的原子量，m_e 是电子质量，$Q=$ CHARGE（参见输入的READ 声明 #1）是分子（离子）的正负整数净电荷。当然，如果分子没有电荷（$Q=0$），该方程将退化为一般二体系统的约化质量。

计算的核心是解方程（1），得到势函数 $V_J(R)$ 的特征值 $E_{v,J}$ 和特征函数 $\Psi_{v,J}(r)$。这由子程序SCHRQ 完成，它基于著名的 Cooley-Cashion-Zare 程序SCHR [1, 2, 3, 7, 8]，但加入了新的功能，可以自动定位和计算“准束缚”或隧穿预离解能级的宽度 [9, 10, 11, 12]。这些能级是位于离解极限之上的亚稳态，但是其离解被势垒所限制。

所得到的特征函数和特征值的精度，主要由方程（1）的数值积分中所使用的（固定）径向网格RH（输入文件的READ 声明 #4）的大小来决定。对于不太陡或过于弯曲的势函数，使用能够在经典允许区域附近的波函节点之间产生至少 30 到 50 个网格点的RH 值，通常可以得到合适的精度。合适的网格尺寸可以用“箱内粒子”型的表达式估计：

$$\mathrm{RH}=\pi/\left(\mathrm{NPN}\times[\mu\times\max\{E-V(r)\}/16.85762920]^{1/2}\right) \tag{2}$$

其中NPN 是每个波函节点所选择的最小网格点数（如 30），$\max\{E-V(r)\}$ 是所计算的能级的局域动能（单位 cm^{-1}）的最大值（一般来说它约等于或小于势阱深度），数值因子在下面的第三章确定。过小的NPN 值会产生不符合所需精度的结果，而过大的值可能会需要过大的计算量，甚至

导致超出数组维度。因此，2式是很好的指标，细心的用户应当总是用不同的RH 值进行计算，以保证结果对具体应用达到所需的精度。

方程（1）的数值积分用 Numerov 算法 [7, 13] 在RMIN 到RMAX 的范围内执行（见READ 声明 #4）。为了启动积分，需要指定位于波函积分区域两个终端附近的网格点初值。对真正的束缚态，在范围 $r = \mathtt{RMAX}$ 以外区域的波函使用（单一）任意值进行初始化，而在内侧网格点附近的初值使用一阶半经典波函或 WKB 波函定义 [14]：

$$\Psi_{v,J}(r) \propto [V_J(r) - E_{v,J}]^{-1/4} \exp\left(-\sqrt{2\mu/\hbar^2}\int^r [V_J(r') - E_{v,J}]^{1/2} dr'\right) \tag{3}$$

在短程区，大多数实际的分子间势能急剧增长，导致波函随着 r 的减小迅速衰减。因此，通常把节点放置在积分范围下界位置（即读入的距离RMIN），来对内侧端点处的波函进行初始化。这可以通过设定 $\Psi_{v,J}(r = \mathtt{RMIN}) = 0$，并给定任意（非零）值的 $\Psi_{v,J}(r = \mathtt{RMIN} + \mathtt{RH})$ 来实现。对于双原子分子问题，这是正常的情况。注意，通常应当设定RMIN > 0，因为在 $r = 0$ 处，势函数的离心贡献是奇异值。

如果寻找中点位于RMIN 的对称势的特征函数，需要对内侧边界条件进行特殊处理。对于在RMIN 具有节点的反对称能级，上面讲述的正常处理已经足够了。但是对于对称能级，如果势函数的波函在RMIN 处斜率为零，则必须使用另外的方法。该选项内置于子程序SCHRQ 中，通过设置输入参数INNER≤0 来调用。但是，由于这是例外情况，当前版本主程序的正常选项不能改变这一参数，因此想要处理这种特殊情况的用户，可以给READ 声明的 #17（主程序的 #367 行）加入参数INNOD1，或者把代码行 #365 和 366 的INNOD1 和INNOD2 的值重设为 0，并重新编译代码。

如果要使用固壁外部边界条件，可以设置输入整数IV(i)（见READ 声明 #18）为很大的负数（不设定的话表示振动量子数），其绝对值指定固壁所处的径向格点位置。特别是当设置IV(i) < -10 时，可以使固壁（波函的节点）位于能级 i 的第 |IV(i)| 个格点位置。

寻找方程（1）一个特征值的 Cooley 流程 [7, 8] 如图1所示。对任何给定的试探能量，数值积分从RMAX 向内和从RMIN 向外分别执行，直到两个解的片段在选择的匹配点 r_x 处汇合。向内和向外试探函数在 r_x 处的斜率不连续性，可以用来估计特征值收敛到给定试探能量所需的能量校正 [15]，此流程不断重复，直到能量变化小于设定的收敛标准（READ 声明 #4 的参数EPS）。这个流程通常收敛迅速，对于单个极小点的势函数，它对所选的匹配点 r_x 不敏感——只要它位于波函振幅较大的经典允许区。然而，为了保证计算期待值或矩阵元的高精度，通常EPS 应当设定为比实际要求的特征值精度小两个数量级。

对于反对称的双阱势，两个势阱上的波函振幅往往数值差别很大，如果匹配距离 r_x 位于波函振幅非常小的一个势阱，那么SCHRQ 使用的特征值校正算法 [15] 容易变得不稳定。因此，通常需要 r_x 位于振幅最大的势阱。在当前版本的程序中，这个选项由内部控制参数INNER（=SINNER）设定，由自动振动能级搜索子程序ALF 设置为合适的值。于是，对于双势阱或“平缓态”势函数的振动能级，（通常）只需要像正常的单阱势函数一样执行计算（对用户而言）。

一般而言，向外和向内的数值积分必须分别从距离RMIN 和RMAX（通过READ 声明 #4 输入）开

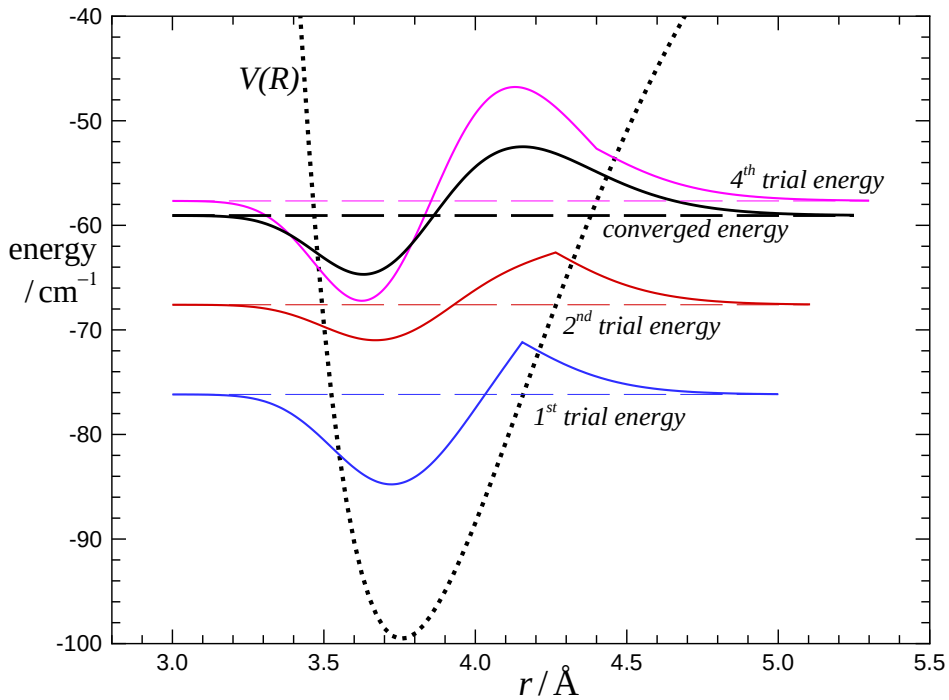

图 1: Löwdin/Cooley 特征值收敛流程 [15, 7] 的示意图，显示了前四个试探能量的波函，它们收敛于模型势函数的 v=1 的特征值。

始，它们必须充分进入经典禁戒区（$V_J(r) > E_{v,J}$），使得波函的振幅比在经典允许区衰减几个数量级。如果衰减因子不小于 10^{-9}，当前版本的代码就会打印警告信息；一旦打印了警告，就需要设定较小的RMIN 和较大的RMAX 值，以保证在这种情况下达到所需的精度。另一方面，如果RMIN 或RMAX 充分位于经典禁戒区，$V_J(r) - E$ 将变得非常大，积分算法对给定的网格尺寸可能变得数值不稳定。对于实际的双原子分子势能曲线，这种情况仅可能发生在接近RMIN 的位置。一旦发生，就会打印警告信息，并且积分区域的起始值自动向外移动，直到问题消失。然而，使用略大的RMIN 值将会导致这些警告信息消失，并（稍微）降低计算量。对于大多数双原子分子，合理的RMIN 值是计算遇到的最小内侧折线点的大约 0.6-0.8 倍，但是对氢化物或者其它小约化质量的分子，可能需要更小的值。

程序内部定义了较小的读入值（READ 声明 #4）的数值积分区上界为RMAX，最大距离与指定网格、内部定义的势（见第三章）和距离数组维度NDIMR 一致。和RMIN 一样，RMAX 的选择并不严格，只要（对实际束缚态）波函的振幅衰减到远小于经典允许区，并且使用同样的振幅衰减测试 10^{-9}。然而，由于典型分子势能曲线的非谐性，RMAX 在高激发振动能级比在最小值附近的低振动能级所需的值大得多。为了减少计算量，因此对每个能级使用3式的半经典结果来确定积分区的上界 $r_{end}(v, J)$，使得波函在经典禁戒区域呈指数衰减，其指数为

$$-\sqrt{2\mu/\hbar^2}\int_{r_2(v,J)}^{r_{end}(v,J)}[V_J(r) - E_{v,J}]^{1/2}dr \tag{4}$$

其中，折线点 $r_2(v,J)$ 标注了经典允许区在能量 $E_{v,J}$ 处的外部端点。对于考虑的每一个能级，SCHRQ 首先定位 $r_2(v,J)$，接下来确定足够大的 $r_{end}(v,J)$ 值，以使初始振幅比在经典允许区小至少 10^{-9} 个量级。在计算能级跨越很宽的能量范围时，程序使用的这个流程总体上可以减少两倍或更多的计算时间。

2.2　定位准束缚能级并决定其宽度

准束缚能级或轨道共振能级或隧穿预离解能级是方程（1）的亚稳特征态，其能量位于势函数渐近极限 $V_J(r=\infty)$ 之上，但在势函数靠外的极大点之下。虽然它们是 $E > V_J(r\to\infty)$ 连续态的一部分，但是有所区别：其波函振幅在势垒内侧短距离处远远比在临近的连续态的波函振幅大，于是会导致不一样的尖锐光谱线。这种态的波函在势垒内侧部分的性质如图2所示。

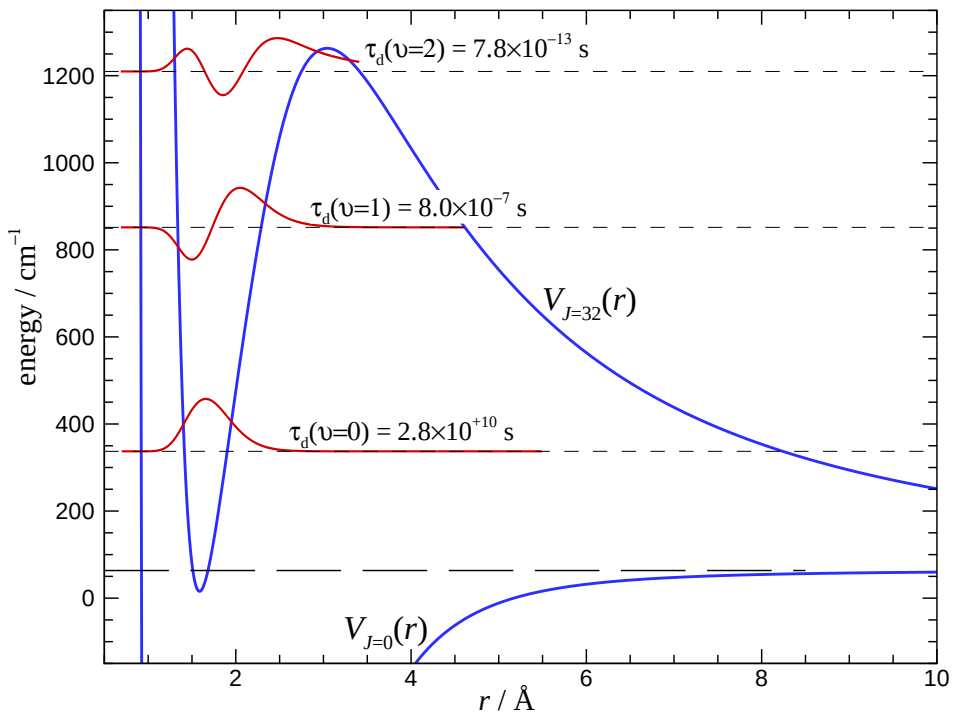

图 2: $CH^{+1}\Pi$ 态的 $J=32$ 离心形变势函数（上面的蓝线）所包含的三个振动能级的准束缚能级波函（红线）和相应的隧穿寿命。来自文献 [16] 的图 2。

按照文献 [9] 和 [10]，通过把标准的 $\Psi_{v,J}(r=\texttt{RMIN})$=0 内侧边界条件与用向内升高 Airy 函数在第三个（最外测）折线点处斜率定义的外部边界条件进行组合，LEVEL 程序可以定位能级。在定位准束缚或隧穿预离解能级的方法中，这一流程是迄今最准确最有效的方法 [9, 10, 11, 17, 18]。实际上它对狭窄的（长寿命）态是很精确的，但对位于势垒最大点以下边缘处的宽能级（如图2中的 v=2），这种方法与其它方法的差异最多是能级宽度（FWHM）的一小部分（如 1/5）。要更准确地预测如此短寿命的态，需要详细地模拟实际的观测过程，因为观测同一准束缚能级的不同方法

会相差一小部分的能级宽度，得到明显不同的能量。例如，如果用光谱手段观测这样的能级，束缚态到连续态光谱的峰应当用光解模拟代码 [19, 20] 计算。

用 Level 程序进行准束缚态的能级宽度或隧穿寿命的计算是基于 Connor 和 Smith[11] 的方程 (4.5)；关于该流程更清楚的说明参见文献 [12] 的 II.B 部分。这是一个统一的半经典流程，其中的预离解率是在给定能量处隧穿能垒的几率，再乘以体系陷入能垒内势阱的振动频率（振动周期的倒数）。实际的计算需要求解遍及两个最外测经典折线点之间区域的4式类型的积分（即，积分上限 $r_{end}(v,J)$ 替换为最外侧折线点 $r_3(v,J)$），和两个内侧折线点之间遍及经典允许区的一个类似积分：

$$\sqrt{2\mu/\hbar^2}\int_{r_1(v,J)}^{r_2(v,J)}[E_{v,J}-V_J(r)]^{-1/2}dr \tag{5}$$

以及一个考虑了能垒最大附近的相位校正因子（能量导数）[10, 11]。这个流程产生的宽度非常可靠，特别是对窄的（长寿命）能级，但是对非常宽的能级约有 10% 甚至更多的不确定性 [10, 11]。为了对这样的能级获得更精确的结果，仍然需要对观测的能级直接进行过程的模拟。在图2的结果中，隧穿寿命的范围大致是 1 飞秒到 900 年，表明产生的隧穿寿命具有相当大的范围。

实际而言，如果数值积分区域的上限RMAX 小于亚稳能级最外侧折线点 $r_3(v,J)$，程序解析计算4式在能垒内部的积分，而通过把离心型项 C_2/r^2 添加到RMAX 处的势函数上，来对其余积分段的势函数做近似，从而合理地估计宽度。一旦启用了近似，就会在主通道 6 的输出文件中打印警告信息（例如，见附录 G 示例 3 的输出文件）。

2.3 计算双原子分子离心畸变常数

给定振动能级的分子转动子能级习惯用幂级数表示：

$$\begin{aligned} E_{v,J} &= G(v)+B_v[J(J+1)]-D_v[J(J+1)]^2+H_v[J(J+1)]^3+\ldots \\ &= \sum_{m=0} K_m(v)[J(J+1)]^m \end{aligned} \tag{6}$$

如果需要，程序将计算惯性转动常数 $B_v=(\hbar^2/2\mu)\langle v,J|1/r^2|v,J\rangle$ 和以上展开式的前六个离心畸变常数（$-D_v$，H_v，L_v，M_v，N_v，和 O_v）的值。当计算无转动（J=0）势函数的振动能级时，这些常数具有其正常的意义 [21]，而当计算 $J>0$ 的振转能级时，这些常数简单地与能量对 [J(J+1)] 的导数相关。调用这些常数的计算需要设定输入参数LCDC>0（参见READ 声明 #17），使用基于 Tellinghuisen 重新公式化 [22] 的 Hutson 精确量子力学方法 [23] 子程序进行计算，程序已扩展到高阶项，可以计算 N_v 和 O_v。为了保证计算稳定、完全收敛，通常需要设定READ 声明 #4 中的特征值收敛参数EPS 为非常小的数（例如，$\lesssim 10^{-6}$ cm^{-1}）。

2.4 计算期待值，矩阵元和爱因斯坦系数 $\mathcal{A}$

如果需要，程序将计算 $M(r)$ 函数的期待值或矩阵元，$M(r)$ 既可以是一组输入值的内插，也可以是用户定义的解析函数，或是用户指定径向变量RFN(r) 的幂级数：

$$M(r) = \sum_{i=0}^{\mathtt{MORDR}} \mathtt{DM}(i) \times \mathtt{RFN}(r)^i \tag{7}$$

其中的参数MORDR，IRFN 和RREF 定义了由READ 声明 #19 输入的幂级数的区间和径向变量RFN(r) 的类型，以及由READ 声明 #20 输入的幂级数因子DM(i)。在最后一个函数形式的选项中，通过选择输入变量IRFN 的范围在-4≤IRFN≤9，可以定义径向变量RFN(r)（参见第四章READ 声明 #19 的注释）；如果设置IRFN≥10，将导致对一组读入数值进行内插和外推来定义 $M(r)$；而设定IRFN≤-10，将导致 $M(r)$ 为用户自定义的解析径向函数。对于最后一种情况，计算所需函数的代码将以主程序 #508-529 行的例子所示范的方式插入到程序中。如果通过对一组读入数据点内插来定义 $M(r)$，需要由READ 声明 #21–24 来输入必要的信息。

习惯的 Franck-Condon 因子 $FCF = |\langle\Psi_{v',J'}|\Psi_{v'',J''}\rangle|^2$ 是RFN(r) 零次幂矩阵元的平方，只要计算非对角矩阵元时（也就是只要输入参数LXPCT ≥3）就会产生。在这种情况下，程序还假定 $M(r)$ 是跃迁偶极函数（单位 Debye），并使用其矩阵元计算两个耦合能级之间的爱因斯坦系数 $\mathcal{A}$。如果选择了逐点的（IRFN≥10）或用户定义的解析（IRFN≤-10）矩阵元实参函数 $M(r)$，MORDR 和DREF 都是哑元，不需要读入DM(r) 因子。注意：如果只想计算 Franck-Condon 因子，应当设定MORDR<0，这种情况下IRFN 和DREF 都是哑元，不需要读入DM(r) 值。

从初态能级 (v', J') 到终态能级 (v'', J'') 自发辐射率的爱因斯坦系数 $\mathcal{A}$ 由下面的表达式定义 [21, 24]：

$$\mathcal{A} = 3.1361891 \times 10^{-7}\,\frac{S(v'', J'')}{2J'+1}\nu^3|\langle\Psi_{v',J'}|M(r)|\Psi_{v'',J''}\rangle|^2 \tag{8}$$

这里：$\mathcal{A}$ 的单位是 s^{-1}，$M(r)$ 是以 Debye 为单位的偶极距（或者跃迁距）函数，ν 是以 cm^{-1} 为单位的发射频率，$S(v'', J'')$ 是 Hönl-London 转动强度因子，$\Psi_{v',J'}$ 和 $\Psi_{v'',J''}$ 是归一化的初态和末态单位径向波函。当前版本的代码把表达式 $S(v'', J'')$ 中符合宇称选择定则且 $\Delta\Lambda = 0$ 或 ±1 的单重-单重跃迁合并在一起。然而，本代码 7.7 以前的版本使用 Herzberg 的 $S(v'', J'')$ 表达式 [21]，随后的版本使用 Hansson 和 Watson 推荐的经过修改的 Hönl-London 因子 [25]，这些因子对于 $\Pi-\Sigma$ 和 $\Sigma-\Pi$ 跃迁要比 Herzberg 报导的因子大四倍 [21]（此外参见 Bernath[24]）。要把这些选择定则推广到其他情况，用户需要修改子程序MATXEL 的 #60-106 行。

2.5 定义无转动的势函数 $V(r)$

读取必要的输入并返回势函数数组及相应参数的势函数包由子程序PREPOT 控制。它使用子程序包GENINT 对一组读入的折线点进行内插/外推，子程序POTGEN 用于产生解析势函数。必要的

输入参数值由READ 声明 #5-16 读入；对于输入NUMPOT=2 设定的两个态的情况，这个输入声明块读入两次。

可以选择定义势函数的方法，要么由READ 声明 #8 从输入读入NTP 个折线点 $\{\mathtt{XI}(i), \mathtt{YI}(i)\}$，要么用解析函数（设定NTP≤0）。前者对读入的折线点用输入参数NUSE 所指定的方法进行内插，产生网格尺寸为RH 的数组，用于方程（1）的数值积分。如果NUSE> 0，调用分段的NUSE 点多项式 (典型的是NUSE= 8 或 10)；如果NUSE≤0，使用三次样条函数进行插值。如果数值积分区域 [RMAX,RMIN] 超过了输入的折线点的范围，将会调用合适的外推程序。特别是在距离小于第二个读入的折线点XI(2) 时，势函数用拟合最初三个折线点的指数函数向内做外推。类似地，如果RMAX > XI(NTP-1)，r>XI(NTP-1) 的势函数用指数型函数，或者倒数幂项之和向外做外推，这通过READ 声明 #6 的参数ILR，NCN 和CNN 指定（见第四章）。

如果用解析函数而不是点数组定义势函数，那么READ 声明 #5 的整数输入参数NTP 要设置为≤0。程序接下来跳过READ 声明 #6-8 进入到 #9-16（见第四章），在这里读入定义所选的解析势函数所需的参数值。当前版本的代码允许下面七类解析势能函数：

2.5.1 $Lennard-Jones$(m,n) 势函数

$$V(r) = \mathcal{D}_e \left[\left(\frac{n}{m-n} \right) \left(\frac{r_e}{r} \right)^m - \left(\frac{m}{m-n} \right) \left(\frac{r_e}{r} \right)^n \right] \tag{9}$$

其中 $\mathcal{D}_e$ 是势阱深度，r_e 是平衡核间距。

2.5.2 多项式势函数

多项式势函数基于 Seto 修改的 [26]Šurkus 的 GPEF 势函数形式 [27]，作为特殊情况，通过调用特殊定义的 GPEF 展开变量（见第四章READ 声明 #9 讨论），它包括了我们熟悉的 Dunham 展开 [28]，Simons-Parr-Finlan 展开 [29]，和 Ogilvie-Tipping 展开 [30]：

$$z = \frac{r^p - {r_e}^p}{a_S r^p + b_S {r_e}^p} \tag{10}$$

$$V(r) = \beta_0 z^2 \left(1 + \sum_{i+1}^{N_\beta} \beta_i z^i \right) \tag{11}$$

2.5.3 “扩展的 Morse 振荡”或 EMO 势函数

EMO 函数 [26, 31, 32, 33]：

$$V(r) = \mathcal{D}_e \left[1 - e^{\beta(r)\cdot(r-r_e)} \right]^2 \tag{12}$$

其中，$\beta(r)$ 是广义 Šurkus 变量 [27]

$$y_q(r) = y_q(r; r_{ref}) = y_q^{ref}(r) = \frac{r^q - r_{ref}^q}{r^q + r_{ref}^q} \tag{13}$$

的简单多项式 $\beta(r) = \sum_{i=0}^{N_\beta} \beta_i [y_q(r)]^i$，其中 q 是经过选择的小的正整数。用这种势函数形式，最常见的参考距离 r_{ref} 设定为等于平衡距离 r_e，但如果设定为较大的值会更有优势 [34, 35]。把指数展开截断到某一项，会产生类似的简单 Morse 势函数。

POTGEN 允许的另一种 Morse 势函数是 Hua Wei（卫华）的四参数势函数 [36]：

$$V(r) = \mathcal{D}_e \left([1 - e^{-b(r-r_e)}] / [1 - Ce^{-b(r-r_e)}] \right)^2 \tag{14}$$

2.5.4 “Morse/长程”或 MLR 势函数

MLR 势函数 [37, 34, 35] 的最初版称为“Morse/Lennard-Jones”（MLJ）势函数 [38, 33]，其中一个灵活的 Morse 型函数用于势阱，并包含一项用于长程相互作用能 $u_{LR}(r)$ 的表达式，由理论预测的前一个（MLJ）或前几个（MLR）幂倒数项构成：

$$V(r) = \mathcal{D}_e \left[1 - \frac{u_{LR}(r)}{u_{LR}(r_e)} e^{-\beta(r) \cdot y_p^{eq}(r)} \right]^2 \tag{15}$$

这里，指数部分显含的径向变量是13式中广义 Šurkus 型变量的特例，其中 r_{ref} 固定在平衡距离 r_e 处：

$$y_p^{eq}(r) = y_p(r; r_e) \equiv \frac{r^p - r_e^p}{r^p + r_e^p} \tag{16}$$

指数因子函数 $\beta(r)$（通常）写作两个 Šurkus 型变量约束多项式展开 [27]，两个变量都有13式的形式，但是用不同的整数 p 和 q 来定义 [35]：

$$\beta(r) = y_p^{ref}(r)\beta_\infty + \left[1 - y_p^{ref}(r)\right] \sum_{i=0}^{N_\beta} \beta_i [y_q^{ref}(r)]^i \tag{17}$$

按照 Tao 等人的描述 [39]，17式的另一种选择是把 $\beta(r)$ 用独立变量 $y_p^{ref}(r)$ 的正常三次样条来表示，这里的变量是一套指定的输入点。

三个径向变量 $y_p^{eq}(r)$，$y_p^{ref}(r)$，和 $y_q^{eq}(r)$ 的渐进特性意味着

$$\beta_\infty \equiv \lim_{r \to \infty} \beta(r) = \ln \left\{ \frac{2\mathcal{D}_e}{u_{LR}(r_e)} \right\} \tag{18}$$

当 $r \to \infty$ 时，整个势函数具有 $V(r) \simeq \mathcal{D}_e - u_{LR}(r)$ 的形式。15式的长程相互作用能函数既可以写做“无衰减”的 [40, 37]：

$$u_{LR}(r) = \frac{C_{m_1}}{r^{m_1}} + \frac{C_{m_2}}{r^{m_2}} + \cdots \tag{19}$$

也可以写做“衰减”的 [35, 41, 42]：

$$u_{LR}(r) = \sum_i D_{m_i}(r) \frac{C_{m_i}}{r^{m_i}} \tag{20}$$

幂倒数项求和形式。20式中的衰减函数有两种选择：一种是基于 Douketis 等建议的形式 [43]：

$$D_m^{DS(s)}(r) = \left[1 - \exp\left\{-\frac{b^{ds}(s)\cdot(\rho r)}{m} - \frac{c^{ds}(s)\cdot(\rho r)^2}{\sqrt{m}}\right\}\right]^{m+s} \tag{21}$$

另一种是基于 Tang 和 Toennies 建议的形式 [44]：

$$D_m^{TT(s)}(r) = 1 - e^{-b^{tt}(s)\cdot\rho r} \sum_{k=0}^{m-1+s} \frac{(b^{tt}(s)\cdot\rho r)^k}{k!} \tag{22}$$

在两个式子中，ρ 是依赖于系统的换算参数 [43, 35]，而 $b^{ds}(s)$，$c^{ds}(s)$，和 $b^{tt}(s)$ 是已知的系统无关常数 [35]。

这两种广义 [35] 衰减函数形式均有这样的性质：在非常小的 r 处，对所有的 m 和 s 值有

$$D_m^s(r)/r^m \simeq r^s \tag{23}$$

原始的 Tang-Toennies 模型对应 s = +1 的情况，若 $u_{LR}(r)$ 是势函数的附加贡献（见下边的例子），这不会有问题。但是它不能用于需要 $s \leq 0$ 的 MLR 势函数的形式，否则势函数的排斥墙在 $r \to 0$ 时会发生翻转并接近于 0。Douketis 等的原始模型 [43] 对应 s = 0 的情况，无论对于 MLR 势函数还是以下的势函数都不会发生形式上的问题，文献 [35] 的结果建议较好的选择是 s = -1 或 s = -1/2，因为它们在非常小的 r 处具有更真实的物理行为。

长程相互作用能并不局限于19或20式中的求和，还可以使用任何理论预测的形式。特别是在当前版本的 Level 中，它还可以表示为双态 [34, 45] 或三态耦合 [46, 47] 类型导致的 2×2 或 3×3 对角化的一个根，这在碱金属二聚物的第一个 $nS + nP$ 渐进极限已经遇到。

这些选项的细节在第四章介绍。

2.5.5 “双指数长程”或 $DELR$ 势函数

$DELR$ 势函数 [12]：

$$V(r) = A\, e^{-2\beta(r)\cdot(r-r_e)} - B\, e^{-\beta(r)\cdot(r-r_e)} + u_{LR}(r) \tag{24}$$

其中，$\beta(r) = \sum_{i=0}^{N_\beta} \beta_i [y_q(r)]^i$ 是关于13式 Šurkus 变量 $y_q^{ref}(r)$ 的简单幂级数，$u_{LR}(r)$ 是从19或20式选择的函数形式之一，表示长程区。因子 A 和 B 通过势垒深度和 $V_{LR}(r)$ 在 r_e 处的性质进行定义：

$$A = \mathcal{D}_e + V_{LR}(r_e) + V'_{LR}(r_e)/\beta_0 \tag{25}$$

$$B = 2\mathcal{D}_e + 2\, V_{LR}(r_e) + V'_{LR}(r_e)/\beta_0 \tag{26}$$

其中的 $V'_{LR}(r_e) \equiv dV_{LR}(r)/dr|_{r=r_e}$。

2.5.6 广义 HFD 势函数

广义 HFD 势函数 [48, 49] 用约化距离变量 $x = r/r_e$ 定义：

$$V(r) = Ax^{\gamma}e^{-\beta_1 x-\beta_2 x^2} - D(x)\sum_m C_m/r^m \tag{27}$$

其中的 $D(x) = \exp\{-\alpha_1[\alpha_2/x - 1]^{\alpha_3}\}$ 是全局衰减函数，用于把幂的倒数项在短距离处截断。

2.5.7 “X-展开”或者“Hannover 多项式”势函数（HPP）

HPP 势函数是由 Tiemann 及其合作者引入的 [50]，用 GPEF 型的幂级数描述势函数的主要部分：

$$V(r) = \beta_0 + \beta_1\xi + \beta_2\xi^2 + \beta_3\xi^3 + \beta_4\xi^4 + \ldots \tag{28}$$

其中 $\xi \equiv \xi(r, b, r_m) = (r - r_m)/(r + b\, r_m)$。28式可能出现的非零线性项（$\beta_1 \neq 0$）意味着当 $\beta_1 \neq 0$ 时，参数 r_m（输入为 r_e=REQ）仅仅近似地对应于平衡距离。在指定的小距离位置，这个幂级数与指数函数平滑连接；而当超过指定的长距离位置，它就会连接到19式形式的幂倒数求和。

注意：

除了第二种类型的简单多项式势函数，所有这些解析势函数都用渐近极限处的绝对能量进行定义，这由输入参数VLIM 指定（见READ 声明 #5）。对于 HPP 势函数，这需要设定 a_0=VLIM-$\mathcal{D}_e$。但是第二类的 $GPEF$ 型势函数用最低点的能量来定义。

用户也可以引入自建的解析势函数形式，只需要用自己的势函数例程替换子程序POTGEN，并把READ 声明 #5 的输入参数NTP 设定为负整数。为了保留与当前代码其它部分的兼容性，用户自备的POTGEN 子程序应当有如下的实参列表：

```
POTGEN(LNPT, NPP, IAN1, IAN2, IMN1, IMN2, VLIM, R, RM2, VV, NCN, CNN)
```

第一个实参是参数LNPT，是一个整数，在 Level 程序中固定为LNPT=1。[1] 其它的输入量为：指定径向距离数组R(i)（单位 Å）大小的整数NPP——将对这些点产生势函数的值，平方倒数距离数组RM2(i)=1/R(i)^2，势函数渐进极限的绝对能量VLIM（单位 cm^{-1}），以及给定特定同位素的原子序号（IAN1 和IAN2）和质量数（IMN1 和IMN2）的整数（计算 BOB 项时需要，见下）。子程序返回NPP 点的势函数值数组VV(i)（单位 cm^{-1}），以及整数NCN，和正的实数因子CNN。对于程序自动

[1]不过在 Level 中并不使用。LNPT 保留在调用序列中，以便在其它程序中调用该子程序包。

寻找给定势函数的多个或所有振动能级的选项（当输入参数NLEV1 为很大的负数时，见READ 声明#17），长程势函数的极限假定形式为 $V(r) \simeq \mathcal{D} - \mathtt{CNN}/r^{\mathtt{NCN}}$，其中POTGEN 返回的参数NCN 和CNN 可以用在近离解理论 [51, 52, 53] 的算法中，用于估算缺失能级的个数及能量。如果用户的解析势函数有势垒极大值，或者指数衰减而不是幂倒数的形状，那么NCN 需要设定为某一较大整数值（例如，NCN=99）。

2.6 Born-Oppenheimer 分解径向强度函数

近些年来，结合同位素的光谱数据分析变得越来越常见，要求无转动的离心势能函数包含依赖原子质量的 Born-Oppenheimer 分解（BOB）校正。如果输入参数的值IBOB>0，LEVEL 将会包含这些项。这些（可选的）函数在文献 [54] 中定义。特别是对每个原子 a=A 或 B，势能函数加入的校正定义为13式 Šurkus 变量的约束多项式：

$$\left(\frac{M_a - M_a^{ref}}{M_a}\right)\left(y_{p_{ad}}^{eq}(r)u_\infty^a + [1 - y_{p_{ad}}^{eq}(r)]\sum_{j=0}^{N_{ad}^a} u_j^a [y_{q_{ad}}^{eq}(r)]^j\right) \tag{29}$$

其中，M_a 是原子 a 特定同位素的质量，M_a^{ref} 是该原子所选择的参考同位素质量 [54]，$y_{p_{ad}}(r)$ 和 $y_{q_{ad}}(r)$ 具有13式的形式，整数 p_{ad} 和 q_{ad} 的选择在文献 [54] 和 [34] 中有讨论。

离心 BOB 校正是应用在方程（1）整体势函数 $V_J(r)$ 的离心贡献上的乘数因子 [1+$g_A(r)$+$g_B(r)$]，其中关于两个原子 a=A 或 B 的项具有与29式“绝热”势函数校正相同的径向形式类型：

$$g_a(r) = \frac{M_a^{ref}}{M_a}\left(y_{q_{na}}^{eq}(r)t_\infty^a + [1 - y_{q_{na}}^{eq}(r)]\sum_{j=0}^{N_{na}^a} t_j^a [y_{q_{na}}^{eq}(r)]^j\right) \tag{30}$$

但是注意，这个表达式没有独立整数 p_{na}，因为我们知道没有关于这些函数的极限长程行为的理论预测。但是，保留了17和29式的代数结构以便用于分子离子的情况，这种情况下 t_∞^a 应当非零 [54]。

第三章　单位，物理常数，数组维度，输入/输出习惯，与程序的执行

除非另有说明，本程序中所有输入的长度和能量单位分别假定是 Å 和 cm^{-1}。主要的例外是7式中用来计算8中爱因斯坦系数的跃迁偶极函数 $M(r)$，它由READ 声明 #20 的展开因子DM(i) 定义（见第四章），假定单位是 Debye（其中 1 Debye = 3.335 640 952$\times 10^{-30}$ [C·m] = 0.393 430 295 [au]）。然而需要注意，如果由选项IRFN≥10 对读入的点（见READ 声明 #19）进行数值内插，生成定义矩阵元实参的径向函数，那么通道 6 的输出在描述读入的跃迁矩函数值做内插时，可能（不正确地）用到单位 cm^{-1} 而不是 Debye，这是因为内插用同一个子程序包来处理输入的逐点势函数。还要注意，如果用一组读入的点定义势函数或矩阵元实参 $M(r)$，这些值可以用任何方便的单位，因为总要读入合适的转换因子（见READ 声明 #7 和 23）把它们转成合适的单位。

程序中的物理常数出现在两个地方。第一个是出现在径向薛定谔方程（1）中的无量纲因子 $\hbar^2/(2u_0E_0{r_0}^2) = 16.857629206$，其中，选择参考质量 u_0=1 amu，距离 r_0=1Å，能量 E_0=1 cm^{-1} 可以有效地定义输入/输出变量的单位。第二个是在8式定义数字因子的项中，用于计算爱因斯坦自发辐射率系数。这些常数当前的值基于参考文献 [55] 的《2012 CODATA》推荐值，而所有原子所有稳定同位素的质量存在子程序MASSES 中，来自参考文献 [56] 的《The AME2012 Atomic Mass Evaluation》。

用户可能想要修改的数组维数上限在主驱动例程以及子程序GENINT 和SPLINT 的PARAMETER 声明中设定。在前者中，NDIMR（当前是 250001）是定义势函数、波函、径向期待值/矩阵元实参的径向格点数组的最大维数。对于小约化质量的体系，可以很安全地把此值设定得更小一些。在主程序中设置的第二个参数是VIBMX (当前是 400)，定义了读入或存储的振动特征值的最大振动/转动能级个数，以及当使用NJM> 0 选项时可存储的转动子能级个数的上限——此时对给定的 v 自动产生多个 J 子能级（见READ 声明 #19）。另外两个在代码中设定的数组尺寸参数是：NTPMX（当前是 1600），它是可读入的势函数点的最大数量（或者，对于IRFN>10 是径向矩阵元 $M(r)$ 值），在GENINT 中设定；以及MAXSP（在SPLINT 中设定），是对读入函数值做内插所需的三次样条因子个数，应当设定为等于 4×NTPMX。

程序从通道 5 读入输入数据，把标准输出写入通道 6，并可能（由READ 声明 #5 和 19 的参数LPPOT，LCDC，和LXPCT 控制）把简要的输出文件写入通道 7-10 中的一个或多个。在 UNIX 或

Linux 操作系统环境中执行程序，可能要求在系统或用户的“bin”目录中创建和储存一个名为（比如说）“rlev”的 shell，如这里所示：

```
# UNIX shell ’ rlev’  to execute the compiled version of program LEVEL named
#    lev.x, which is stored in the user’ s directory /upath/ with input data
#    file $1.5 and write output to $1.6, $1.7, etc. all in the current
#    directory.
#
time  ~/upath/lev.x  < $1.5 >  $1.6
mv fort.7 $1.7 >& /dev/null
mv fort.8 $1.8 >& /dev/null
mv fort.9 $1.9 >& /dev/null
mv fort.10 $1.10 >& /dev/null
```

这个脚本允许程序用简单的命令执行：

```
UserID $> rlev <filename>
```

其中，<filename>.5 是用户创建的输入数据文件（<filename> 可以是任何名称，通常选为识别特定的算例）。这种情况下，通道 6 的标准输出将会写到 <filename>.6 中，而通道 7、8、9、10 的输出将分别写到文件 <filename>.7，...，<filename>.10。

第四章　数据结构和输入参数的定义

程序用于输入数据的所有READ 声明以及相应的逻辑结构都在这里列出。接下来的小节提供了与每个输入变量属性和/或选项有关的详细说明。

```
#1      READ(5,*,END=999) IAN1, IMN1, IAN2, IMN2, CHARGE, NUMPOT
#2a     IF(IAN1.LE.0) READ(5,*) NAME1, MASS1
#2b     IF(IAN2.LE.0) READ(5,*) NAME2, MASS2
#3      READ(5,*,END=999) TITL
#4      READ(5,*) RH, RMIN, RMAX, EPS
        DO  IPOT= 1, NUMPOT
#5          READ(5,*) NTP, LPPOT, OMEGA, VLIM
            IF(NTP.GT.0) THEN
#6              READ(5,*) NUSE, IR2, ILR, NCN, CNN
#7              READ(5,*) RFACT, EFACT, VSHIFT
#8              READ(5,*) (XI(I), YI(I), I= 1,NTP)
              ELSE
#9              READ(5,*) IPOTL, PPAR, QPAR, APSE, Nbeta, IBOB
#10             READ(5,*) DSCM, REQ, Rref
#11             IF(IPOTL.GE.4) READ(5,*) NCMM, rhoAB, IVSR, IDSTT
#12             IF(IPOTL.GE.4) READ(5,*) (MMLR(I), CMM(I),I= 1, NCMM)
                IF(NVARB.GT.0) THEN
                    IF((IPOTL.EQ.4).AND.(APSE.GT.0)) THEN
#13a                    READ(5,*) (XPARM(I),PARM(I), I=1,NVARB)
                      ELSE
#13b                    READ(5,*) (PARM(I), I=1,NVARB)
                      ENDIF
                    ENDIF
                IF(IBOB.GT.0) THEN
#14                 READ(5,*) MN1R, MN2R, pAD, qAD, NU1, NU2, pqNA, NT1, NT2
#15                 IF(NU1.GE.0) READ(5,*) U1INF, (U1(I), I=0,NU1)
#16                 IF(NU2.GE.0) READ(5,*) U2INF, (U2(I), I=0,NU2)
#17                 IF(NT1.GE.0) READ(5,*) T1INF, (T1(I), I=0,NT1)
#18                 IF(NT2.GE.0) READ(5,*) T2INF, (T2(I), I=0,NT2)
                    ENDIF
```

```
                ENDIF
            ENDDO
#19     READ(5,*) NLEV1, AUTO1, LCDC, LXPCT, NJM, JDJR, IWR, LPRWF
        NLEV= MAX(1,NLEV1)
#20a    IF(AUTO1.GT.0) READ(5,*) (IV(I), IJ(I), I= 1,NLEV)
#20b    IF(AUTO1.LE.0) READ(5,*) (IV(I), IJ(I), GV(I), I= 1,NLEV)
        IF((LXPCT.NE.0).AND.(LXPCT.NE.-1)) THEN
#21         READ(5,*) MORDR, IRFN, DREF
#22         IF((IABS(IRFN).LE.9).AND.(MORDR.GE.0)) READ(5,*) (DM(J), J= 0,MORDR)
            IF(IRFN.GE.10) THEN
#23             READ(5,*) NRFN, RFLIM
#24             READ(5,*) NUSEF, ILRF, NCNF, CNNF
#25             READ(5,*) RFACTF, MFACTF
#26             READ(5,*) (XIF(I), YIF(I), I= 1,IRFN)
               ENDIF
            ENDIF
        IF(IABS(LXPCT).GE.3) THEN
#27         READ(5,*) NLEV2, AUTO2, J2DL, J2DU, J2DD
#28a        IF(AUTO2.GT.0) READ(5,*) (IV2(I),I= 1,NLEV2)
#28b        IF(AUTO2.GT.0) READ(5,*) (IV2(I),GV(I),I= 1,NLEV2)
          ENDIF
```

4.1 输入文件数据的定义与说明

读取用于标识分子或体系的整数。

#1. READ(5,*,END=999) IAN1, IMN1, IAN2, IMN2, CHARGE, NUMPOT

IAN1 & IAN2: 构成分子的两个原子/粒子的整数原子序号。如果两个都是 ≤109 的正数，将用子程序MASSES 列表中的原子量产生体系的约化质量。如果其中一个原子序号 ≤0 或 >109，粒子质量将从READ 声明 #2 读入。

IMN1 & IMN2: 构成分子的两个原子/粒子的整数质量数。对于常见的稳定原子同位素，它的质量将取自子程序MASSES 列表；如果原子在常见稳定同位素的范围之外，将使用按丰度平均的原子质量。

CHARGE: 分子总电荷的正、负整数。用于对分子离子生成 Watson 的电荷校正约化质量 [6]：$\mu = M_A M_B/(M_A + M_B - m_e \times \mathrm{CHARGE})$，其中 m_e 是电子质量。

NUMPOT: 势函数的数量：=1 的计算仅涉及一个势函数；=2 用于输入和生成两个不同的势函数，并计算耦合它们能级的矩阵元。

在IAN1 和/或IAN2≤0 或 > 109 的特例中，读入粒子的双字符字母数字名称及其质量（amu 单位）。这有助于处理模型体系或奇异种类粒子，如 μ 子偶素或电子偶素形成的“分子”。

#2a. `IF(IAN1.LE.0) READ(5,*) NAME1, MASS1`

#2b. `IF(IAN2.LE.0) READ(5,*) NAME2, MASS2`

`NAME1 & NAME2:` 双字符的由字母数字构成的名称，用于读入其质量的（一个或两个）粒子，包含在单引号中，如`'mu'`。

`MASS1 & MASS2:` 两个粒子的质量，amu 单位。

读取文本标题或计算的描述。

#3. `READ(5,*,END=999) TITL`

`TITL:` 描述计算的标题或输出标题，由最多 78 个字符的一行构成，包含在单引号中，如`'title of problem'`。

读取定义数值积分网格和范围的实数（单位都是 Å），以及使用的特征值收敛标准（单位 cm^{-1}）。

#4. `READ(5,*) RH, RMIN, RMAX, EPS`

`RH:` 数值积分的格点尺寸；见第2.1节2式的有关讨论。

`RMIN & RMAX:` 分别为数值积分范围的内侧和外侧界限（见第二章）。作为似乎可能的零级估算，可以设定RMIN≈0.6×（势函数的内壁位置），RMAX 非常大（如 40Å）。在程序内部，RMAX 设定为此读入值与RMIN、RH、数组维度NDIMR 允许的最大距离（参见第三章）二者中较小的一个。

`EPS:` SCHRQ 使用的特征值收敛参数（单位 cm^{-1}）。为保证生成合适精度的期待值或矩阵元，通常此值设定为比实际所需特征值的精度小约 2 个数量级。

下面 13 个READ 声明的组合定义了势能函数。一个特例是总由READ 声明 #5 开始，但接下来要么使用READ 声明 #6-8 对一组输入折线点进行数值内插，或者对解析势函数的情况使用READ 声明 #9-18（其中的某些）。

#5. `READ(5,*) NTP, LPPOT, OMEGA, VLIM`

`NTP:` 整数。设置为 ≤0 时，使用POTGEN 产生解析势函数，这种情况下程序跳过READ 声明 #6-8，直接进入READ 声明 #9。如果NTP> 0，它是通过READ 声明 #8 输入的折线点数组对的个数。

`LPPOT:` 控制势函数数组的打印（通常设置为 0，无打印）。如果LPPOT> 0，势函数数组和

它的前两阶差分导数每到第LPPOT 个网格点就会写到标准输出（通道 6）中；这在排除故障时有时很有用。设定LPPOT< 0，把在每第 |LPPOT| 个网格点的势结果，以简洁形式写到通道 8；如果想把势函数输入到绘图程序中，这会非常有用。

OMEGA： 是该电子态的电子轨道角动量在分子轴上的（整数）投影，于是约化的离心势函数变为 $[J(J+1)-\mathrm{OMEGA}^2]\hbar^2/2\mu r^2$。对于限定到平面的转动，设定OMEGA≥99 会导致离心势函数具有近似的形式：$(J^2-1/4)\hbar^2/2\mu r^2$。

VLIM： 势函数渐近极限的绝对能量（单位 cm^{-1}）。它设定输出中见到的绝对能量标度。对于幂级数（$GPEF$ 或 Dunham 型）势函数（IPOTL=2），它是势函数最小点 $r=r_e$ 处的能量。

对于逐点的势函数（若NTP>0），必须指定如何进行内插，另外由于RMAX 经常位于输入折线点的范围以外，因此还必须指定势函数在大 r 处如何外推。如果NTP≤0，直接向下跳到READ 声明 #9。

#6. READ(5,*) NUSE, IR2, ILR, NCN, CNN

NUSE： 指定如何内插。如果NUSE>0，使用NUSE 点分段多项式；如果NUSE≤0，进行三次样条内插。对于高精度、光滑的输入点，例如由 RKR 计算生成的点，NUSE=8，10 或 12 通常足够合适；对于较低精度或不够密集的点，例如由从头计算得到的点，低阶的逐点多项式（NUSE=4）或样条（NUSE≤0）通常最好。

IR2： 对非常陡的排斥势壁，更好的内插通常通过对 $r^2\times V(r)$ 内插得到；设定整数IR2>0 即可（通常推荐）。比较打开和关闭（设定IR2≤0，导致对 $V(r)$ 内插）该选项的结果，可作为最终结果中“内插噪声”不确定性大小的指标。

ILR： 指定如何从读入的最外部折线点外推到RMAX。对于长距离外推，ILR= -1，0 或 1 的通常最合适；然而，如果最外的折线点延伸到距离解极限（位于VLIM）比较近，那么应当设定ILR≥2，并指定NCN（≥1）在理论上的合理值，如果适用的话，还要输入估计的CNN（见下）。

对于ILR<0，最后三个点拟合到：$V(r)=\mathrm{VLIM}-A\times\exp[-b(r-r_o)^2]$

对于ILR=0，最后三个点拟合到：$V(r)=\mathrm{VLIM}-A\times r^p\exp[-br]$

对于ILR=1，最后两个点拟合到：$V(r)=\mathrm{VLIM}-A/r^B$

对于ILR=2 或 3，分别把最外侧两或三个点拟合到两或三个幂倒数项的求和，幂相差 2：$V(r)=\mathrm{VLIM}-\sum_{m=0}^{\mathrm{ILR}-1}C_{\mathrm{NCN}+2m}/r^{\mathrm{NCN}+2m}$

对于ILR≥4，最外侧ILR 个折线点拟合到ILR 个幂倒数项的总和，幂相差 1：$V(r)=\mathrm{VLIM}-\sum_{m=0}^{\mathrm{ILR}-1}C_{\mathrm{NCN}+m}/r^{\mathrm{NCN}+m}$

NCN： 对于ILR≥2 的幂倒数势函数的外推，NCN（> 0）指定幂倒数极限的行为：$V(r)\propto\mathrm{VLIM}-\mathrm{CNN}/r^{\mathrm{CNN}}$。否则（如果ILR≤1）它是输入哑元。

CNN： 对于ILR≥2 的幂倒数势函数的外推，设定CNN≠0 将导致首要的幂倒数因子固定在读入值CNN=C_{CNN} [cm^{-1}Å^{NCN}]，而不是由拟合最外几个折线点决定。

输入的折线点可以来自从头计算或 RKR 计算，可能需要转换到程序内部使用的单位（Å 和 cm^{-1}）。

#7. READ(5,*) RFACT, EFACT, VSHIFT

RFACT & EFACT： 把NTP 个输入折线点，即距离XI(i) 和能量YI(i) 的单位分别转换为 Å 和 cm^{-1} 的乘法因子。如果不需要转换，读入因子1.D+00。

VSHIFT： 添加到输入势函数点的能量上的能量移动（单位 cm^{-1}），从而使它们与VLIM 一致。这是为了解决从头或 RKR 折线点使用了与用户定义的渐进能量VLIM 不一致的零值能量来表示。

读入实际的折线点。

#8. READ(5,*) (XI(I), YI(I), I= 1,NTP)

XI(i) & YI(i)： 是定义势函数的输入折线点（距离和能量）。

如果输入的势函数由子程序POTGEN 的解析势函数定义（NTP≤0 的情况），描述势函数的参数通过READ 声明 #9-18 中的部分或全部来输入。对于用户提供的POTGEN 函数，输入参数（如果有）由用户决定，但是调用顺序必须和PREPOT 要求的顺序一致（参见第2.5节结尾的讨论）。指定READ 声明 #13 参数输入个数的变量NVARB 由程序内部确定，见下面的说明。

#9. READ(5,*) IPOTL, PPAR, QPAR, APSE, Nbeta, IBOB

IPOTL： 整数，指定势的解析函数类型。

IPOTL=1： 产生9式的 Lennard-Jones（m=PPAR,n=QPAR）函数。这种情况下的APSE 和Nbeta 是哑元，且NVARB=0。

IPOTL=2： 用 Seto [26] 重新设定形式的 Šurkus 展开变量 [27]$z = z(r) = (r^{\mathrm{PPAR}} - r_e{}^{\mathrm{PPAR}})/(a_S r^{\mathrm{PPAR}} + b_S r_e{}^{\mathrm{PPAR}})$，产生11式级别为 N_β=Nbeta 的 $GPEF$ 幂级数势函数，其中的 β_0 由输入值DSCM 定义，对于 i=1 到Nbeta 有PARM(i) $= \beta_i$，a_S=PARM(Nbeta+1)，和 b_S=PARM(Nbeta+2)。注意，Šurkus 的PPAR<0 的情况包含在 Seto 的恒等形式 [26] 中：$z(-\mathrm{PPAR}, a_S, b_S) = z(\mathrm{PPAR}, -b_S, -a_S)$。这里，NVARB=Nbeta+2，而QPAR，APSE，和NCMM 都是哑元。

- 通过设定PPAR= 1，a_S= 0.0 & b_S= 1.0，生成 Dunham 展开式。
- 通过设定PPAR= 1，a_S= 1.0 & b_S= 0.0，生成 SPF 展开式。
- 通过设定PPAR= 1，a_S=b_S= 0.5，生成 Ogilvie-Tipping 展开式。

- 通过设定PPAR= 1，Nbeta= 0，a_S= 0.0 和 b_S= 1.0，生成简单的谐性振荡势函数，其谐性力常数为 $k = 2$ DSCM/REQ^2。
- 所有这些多项式型的势函数都有一个未定义的（或者更确切的说法，间接定义的）渐近线，因此参数VLIM 定义了势能极小。
- 如果PPAR= 0，势函数用 r 的Nbeta 阶多项式产生，其中的常数因子设定为 c_0=VLIM，NVARB=Nbeta。

IPOTL=3： 产生12式的 Morse 或 EMO 势函数，其中 $\mathcal{D}_e$=DSCM，r_e=REQ，13式的展开变量用正整数 q=QPAR 定义，其中的展开因子对 i=1 到NVARB=(Nbeta+1) 为PARM(i)=β_{i-1}。这种情况下PPAR 和APSE 都是哑元。设定Nbeta=0 会产生一般的 Morse 势函数。

- 如果PPAR≤0，产生 Hua Wei（卫华）的四参数 Morse 型势函数
  $V(r) = \mathcal{D}_e \left([1 - e^{-b(r-r_e)}]/[1 - Ce^{-b(r-r_e)}]\right)^2$
  其中 b=PARM(1)，C=PARM(2)。这种情况下，NVARB=2，而PPAR，APSE，Nbeta 都是哑元。

IPOTL=4： 产生15–20式的 MLR 或 MLJ 势函数 [38, 57, 33, 37, 34, 35]，其中 $\mathcal{D}_e$=DSCM，r_e=REQ，势函数尾部 $u_{LR}(r)$ 定义为19式的无衰减项 C_m/r^m 或20式的衰减项 $D_m(r)C_m/r^m$ 的幂倒数求和。

- 对于APSE≤0，15式的指数因子用17式的约束多项式展开来表示，其中的正整数PPAR=p 和QPAR=q 为定义径向变量的幂指数，求和的上限为 N_β=Nbeta，指数展开因子对 i=1 到NVARB=(Nbeta+1) 为PARM(i)=β_{i-1}。
- 对于APSE>0，15式的指数因子用Nbeta 个点的自然三次样条来表示，点的距离用一组输入的值 y_q^{ref} 定义，其对 i=1-Nbeta 的纵坐标值 β_i=PARM(i) 定义了势函数的形状。

IPOTL=5： 产生24–26式的 $DELR$ 势函数 [12]，其中 $\mathcal{D}_e$=DSCM，r_e=REQ，定义展开变量 $y_q^{ref}(r)$ 的幂指数为QPAR=p。指数因子 $\beta(r)$ 是关于变量 $y_q^{ref}(r)$ 的简单的指数级数展开，展开因子对 i=1 到NVARB=(Nbeta+1) 为PARM(i)=β_{i-1}。附加的长程尾函数 $u_{LR}(r)$ 通过READ 声明 #11 和 12 的19和20式之一来定义，全部PPAR 是哑元参数。

IPOTL=6： 产生27式的广义 HFD 型势函数，其中 A 和 β_1（在程序内部）由输入值 $\mathcal{D}_e$=DSCM 和 r_e=REQ 定义，定义衰减函数 $D(x)$ 的参数由PARM(i)=α_i，i=1–3 读入，其它的指数因子为 β_2=PARM(4)，γ=PARM(5)。这种情况下，通过READ 声明 #12 输入的幂倒数因子 C_m 应当是无量纲的（乘上 $\mathcal{D}_e {r_e}^m$），NVARB=5，而PPAR，QPAR，APSE，Nbeta 都是哑元参数。

IPOTL=7： 产生28式的“Hannover 多项式势函数”（HPP）[50]，它由变量 $\xi = (r - r_m)/(r + b\, r_m)$ 的Nbeta 阶幂级数构成，其中 b=PARM(Nbeta+2)，因子为 β_i=PARM(i+1)，i=0-Nbeta。势阱深度定义为 $\mathcal{D}_e$=DSCM，参考距离由REQ 读入（$a_1 \neq 0$ 时，不同于

r_e）。对于 $r < r_{inn}$ ≡PARM(Nbeta+3)，势函数在距离 r_{inn} 处通过平滑地加入函数 $A\,e{-}\alpha(r - r_{inn})$，向内做外推。对于 $r > r_{out}$ ≡PARM(Nbeta+4)，势函数作为NCMM 个幂倒数项的和（由READ 声明 #11 和 12 定义）向外做连续外推，（程序内部）还加入一个附加项 C_{m_L}/r^{m_L}，m_L =[MMLR(NCMM)+2]，其因子 C_{m_L}（在程序内部）定义，以使该长程尾函数连续地加入到 $r = r_{out}$ 的多项式上。对于该模型，PPAR，QPAR，和APSE 都是哑元参数，NVARB = (Nbeta+ 4)。

PPAR, QPAR, APSE & Nbeta: 用于描述特定势函数形式（见上）的整数。

IBOB: 一个整数，指定是（IBOB> 0）否（IBOB≤ 0）在无转动（电子的）的和/或离心的 $\{[J(J+1) - \Omega^2]\hbar^2/2\mu r^2\}$ 势函数中包含依赖原子量的 Born-Oppenheimer 分解校正项（参见第2.6节）。

#10. `READ(5,*) DSCM, REQ, Rref`

#11. `IF(IPOTL.GE.4) READ(5,*) NCMM, rhoAB, IVSR, IDSTT`

#12. `IF(IPOTL.GE.4) READ(5,*) (MMLR(I), CMM(I),I= 1, NCMM)`

DSCM: 通常（除了上面IPOTL= 2 的情况）表示 cm^{-1} 单位的势阱深度 $\mathcal{D}_e$。

REQ: 通常（除了上面IPOTL= 7 的情况）表示 Å 为单位的平衡距离 r_e。

Rref: 定义13式指数展开径向变量的参考距离。若输入变量 ≤0.0，代码中设定为 $r_{ref} = r_e$。

NCMM: 整数，对于IPOTL≥4 的情况，指定用于定义势函数长程部分的幂倒数项个数。

MMLR(I) & CMM(I): 对于定义19或20式的长程势函数的NCMM 个幂倒数项，分别为幂指数和因子。[1]

NCMM≥3 且 MMLR(2)=0 ，产生长程尾函数，定义为 2×2 对角化后较低的根，如文献 [34] 所示，应用于 Li_2 的 $A^1\Sigma_u^+$ 态。这个例子中，NCMM= 4，MMLR(i)= 3, 0, 6 & 8，CMM(2) = A_{so}，即 ^{7}Li(2p) 的自旋-轨道分裂能。

NCMM≥3 且 MMLR(2)=-1 ，产生长程尾函数，定义为 3×3 对角化后最低的根，如文献 [46] 所示，应用于 Li_2 的 $c1^3\Sigma_g^+$ 态。这个例子中，仍然有NCMM= 4，MMLR(i)= 3, -1, 6 & 8，CMM(2) = A_{so}，即 ^{7}Li(2p) 的自旋-轨道分裂能。

NCMM≥3 且 MMLR(2)=-2 ，产生长程尾函数，定义为 2×2 对角化后较高的根，如文献 [34] 所示，应用于 Li_2 的 $b^3\Sigma_u^+$ 态。这个例子中，NCMM= 4，MMLR(i)= 3, -2, 6 & 8，CMM(2) = A_{so}，即 ^{7}Li(2p) 的自旋-轨道分裂能。

rhoAB: 选择是（rhoAB> 0）否（rhoAB≤ 0）在长程项中包含衰减函数。如果：

rhoAB =ρ 是依赖系统的换算参数，

[1]不同版本关于这部分参数的变动较大，请参阅所用版本的说明。已更正原文中的一些错误。——译注。

整数 IDSTT >0 指定使用21式 Douketis 型的衰减函数，

整数 IDSTT ≤0 指定使用22式 Tang-Toennies 型的衰减函数，而

整数 IDF 指定极限短程行为是 $D_m r \cdot C_m/r^m \propto r^{\mathrm{IDF}/2}$

#13a. `READ(5,*) (XPARM(I),PARM(I), I=1,NVARB)`

XPARM(i): 为距离坐标 $y_q^{ref}(r_i)$ 的NVARB 个值，且PPARM(i)=β_i 是定义三次样条相应的函数值，用于表示APSE>0 时的 MLR 指数因子函数 $\beta(r)$。

#13b. `READ(5,*) (PARM(I), I=1,NVARB)`

PPARM(I): 描述上述定义的势函数的NVARB 个参数，用于 MLR 势函数APSE>0 以外的所有情况。例如，11，17式，和28式的 β_i 参数，以及定义 EMO 或 $DELR$ 势函数的指数多项式的 β_i 因子。

如果把依赖原子量的 Born-Oppenheimer 分解（BOB）项加入到势能函数和/或离心势函数中（IBOB> 0），使用READ 声明 #14 以及 #15-18 中的一个或多个（根据需要）。这些 BOB 函数通常具有29和30式定义的形式。如果要忽略给定类型的校正函数，那么相关的展开级别（例如，NU1，NU2，NT1，或NT2）需要设定为 <0，这种情况下需要忽略相关的参数READ 声明（#15-18）。但是如果不考虑 BOB 校正（IBOB≤0），则忽略全部READ 声明 #14-18。

#14. `READ(5,*) MN1R, MN2R, pAD, qAD, NU1, NU2, pqNA, NT1, NT2`

MN1R & MN2R: 分别是原子 1 & 2（或原子 A & B）的参考同位素的整数质量数，即出现在29和30式中的质量 M_a^{ref} [58]。

NU1 & NU2: 对于原子 a =1 & 2（或 A & B），是29式中多项展开式的级次 N_{ad}^a。如果任何一个设置为 <0，忽略READ 声明 #15 和/或 16（视情况而定），并忽略该校正。

NTA & NTB: 对于原子 a =1 & 2，是30式中多项展开式的级次 N_{na}^a。如果任何一个设置为 <0，忽略READ 声明 #17 和/或 18（视情况而定），并忽略该校正。

PAD , QAD & QNA: 正整数 p_{ad},q_{ad},q_{na},分别定义势函数的多项式展开变量 $y_p^{eq}(r)$ 和 $y_q^{eq}(r)$，以及29和30式中的离心 BOB 函数。通常应当设定PAD≡ $p_{ad} > m_{last}$ ≡MMLR(NCMM)。如果QAD=0 且UaINF=0，绝热势能校正函数塌陷为 $y_p(r)$ 的简单幂级数。

对于IBOB> 0 的情况，

#15. `IF(NU1.GE.0) READ(5,*) U1INF, (U1(I), I=0,NU1)`

#16. `IF(NU2.GE.0) READ(5,*) U2INF, (U2(I), I=0,NU2)`

#17. `IF(NT1.GE.0) READ(5,*) T1INF, (T1(I), I=0,NT1)`

#18. `IF(NT2.GE.0) READ(5,*) T2INF, (T2(I), I=0,NT2)`

`UaINF & Ua(i)`： 分别是对 a=1 或 2 定义29式“绝热”势校正函数的 (real*8) 展开参数：Ua(j)=u_j^a，UaINF==u_∞^a，单位都是 cm^{-1}。

`TaINF & Ta(i)`： 分别是对 a=1 或 2 定义30式“非绝热”离心势校正函数的 (real*8) 展开参数：所有的Ta(j)=t_j^a 和TaINF==t_∞^a 都是无量纲的。

对于仅涉及单个势能曲线的计算（READ 声明 #1 中的NUMPOT=1），现在直接进行READ 声明 #19。但是如果NUMPOT= 2，先重复READ 声明 #5-18，输入第二个势函数。
现在读入控制计算哪些能级，哪些期待值以及矩阵元（只要有）的参数。

#19. `READ(5,*) NLEV1, AUTO1, LCDC, LXPCT, NJM, JDJR, IWR, LPRWF`

`NLEV1`： 如果 > 0,整数NLEV1 是要计算的振动或振转能级的个数。其量子数的说明通过READ 声明 #20 输入。
如果 ≤0，程序自动寻找从 v= 0 到 |NLEV1|，具有从IJ(1) 读入（见下）的相应转动量子数的所有振动能级。
如果NLEV1 输入值是非常大的负数，程序将（尝试）寻找所有具有指定 J=IJ(1) 的可能振动能级。

`AUTO1`： 整数AUTO1 > 0，导致程序（尝试）对所有需要的能级自动产生实数试探特征值，因此只有其量子数标记需要输入（通过READ 声明 #20a）。
倘若失败，设定AUTO1≤ 0，将允许/需要对每个指定能级（用NLEV1 > 0 选项）输入一个试探能量GV(i)（通过READ 声明 #20b）。

`LCDC`： 如果LCDC> 0，对所有NLEV1 指定的能级计算惯性转动常数 B_v 和前 6 个离心畸变常数 {-D_v，H_v，L_v，. . . 等等}。这些结果还以简洁形式写入通道 9 中。

`LXPCT`： 整数，控制计算哪些期待值/矩阵元。对LXPCT= 0，不计算期待值或矩阵元（因此忽略READ 声明 #21-26）。对于 |LXPCT|≠0 的偶数值，结果以简洁形式写入通道 7 或 8（视情况，见下）以及通道 6 中；奇数LXPCT 值仅产生通道 6 的输出，其中负的LXPCT 值将禁止到通道 6 的大多数（相对冗长的）输出。

`LXPCT= -1`： 导致特征值和（如果可能）准束缚能级宽度以简洁形式写到通道 7，不计算期待值或矩阵元（因此忽略READ 声明 #21-26）。

`LXPCT= 1, 2, -2`： 导致动能期待值和距离变量正幂指数期待值的计算，由READ 声明 #21 加上 #22 或 #23-26（视情况，见下）。如果LXPCT= 1 或 2，把结果写到通道 6；如果LXPCT= 2，还把结果（以简洁形式）写到通道 7；但是如果LXPCT= -2，结果仅（以简洁形式）写到通道 7。

|LXPCT| ≥ 3： 调用势函数 1 的每个能级之间（如果NUMPOT= 1）或到势函数 2 能级（如果NUMPOT=2）的耦合能级矩阵元计算，在READ 声明 #27 和 28 指定。如果LXPCT>0，把结果写到通道 6；如果LXPCT=±4，还把结果（以简洁形式）写到通道 8。

|LXPCT| ≥ 5： 还把构成全体矩阵元的分量径向矩写到通道 7，并把选择定则允许跃迁的全体矩阵元写到通道 8。对LXPCT=±6，只写入分量径向矩，忽略通道 8 的输出。

NJM & JDJR： 如果（整数）NJM> 0，对NLEV1 定义产生的每一个（振动）能级自动计算所有转动子能级 J 的特征值（可能的话，还有期待值和矩阵元），范围从输入指定的 J=IJ(i)（见下）到 J =NJM 的最大值（或者直到振动能级预离解能量超过势垒），J 的增幅是JDJR。例如，要自动生成所有可能的转动能级，设置JDJR= 1，IJ(i) = 0（或者更严格的 =|Ω|），NJM 非常大（例如NJM=999）。

IWR： 一个整数，控制SCHRQ 内的诊断与计算细节的打印输出。

IWR≠**0**： 视情况打印子程序SCHRQ 内的警告与错误信息。除了查错以外，通常设定IWR=-1。

IWR≥**1**： 对每个确定能级还打印最终的特征值和节点。

IWR≥**2**： 还打印结束范围的波函振幅。

IWR≥**3**： 还打印迭代收敛进程中的中间试探特征值。

LPRWF： 如果LPRWF> 0，把每第LPRWF 个格点的波函写到通道 6。
如果LPRWF< 0，把每第LPRWF 个格点的波函以简洁形式写到通道 10。
如果LPRWF= 0，无波函输出。

读取量子数，用于需确定的（势函数 1 的）振转能级。

#20a. IF(AUTO1.GT.0) READ(5,*) (IV(I), IJ(I), I= 1,max{1,|NLEV1|})

#20b. IF(AUTO1.LE.0) READ(5,*) (IV(I), IJ(I), GV(I), I= 1,max{1,|NLEV1|})

IV(i) & IJ(i)： 对于NLEV1> 0，分别是要计算的能级的振动 [v=IV(i)] 和转动 [J=IJ(i)] 量子数；如果NJM>IJ(i)，程序还对 v=IV(i) 的振动能级自动计算 J=IJ(i) 到NJM 的转动能级，步长JDJR。
对于NLEV1≤ 0，读取一个 {IV(i), IJ(i)} 数对。其中忽略IV(1) 的值，但对 J=IJ(1) 的转动量子数计算直到 v = |NLEV1| 所有振动能级。

GV(i)： 如果AUTO1≤0，用READ 声明 #20b 代替 #20a，GV(i) 是对每个能级 v=IV(i)，J=IJ(i) 读入的试探能量。该选项假定NLEV1> 0。

如果计算期待值或矩阵元（即，如果LXPCT≠0 或-1），用READ 声明 #21-26 定义需要的实参。但是，如果LXPCT≠0 或-1，立即结束数据输入。

#21. `READ(5,*) MORDR, IRFN, DREF`

`MORDR:` 指定所选的径向函数或距离坐标RFN(r) 的最高次幂的整数，将对其计算期待值或矩阵素（见7式）。当前版本程序的维数定为MORDR≤20。如果只计算 Franck-Condon 因子（当 |LXPCT|≥ 3 时），输入MORDR= -1。

`IRFN & RREF:` 分别为整数和实数变量，指定径向函数或距离坐标RFN(r) 的定义。

如果IRFN≤-10，RFN 由用户提供的代码产生，代码插入到主程序的 #509-530 行。这种情况下，DREF 是哑元，并忽略READ 声明 #23-26。

如果IRFN=-4，那么RFN(r)=r，矩阵元算符为 r 的MORDR 阶多项式，因子为DM(i)，并在前面乘上作用于势函数 2 上的导数算符 d/dr。

如果IRFN=-3，那么RFN(r)=$1/r^3$。

如果IRFN=-2，那么RFN(r)=$1/r^2$。

如果IRFN=-1，那么使用 Dunham 型的展开因子RFN(r)=$(r - r_{dref})/r_{dref}$。

如果IRFN= 0，那么RFN(r)=r 为距离坐标本身。

如果IRFN= 1-9，那么使用 Šurkus 型变量RFN(r)=$y_p(r) = (r^p - r^p_{dref})/(r^p + r^p_{dref})$，$p$=IRFN。

如果IRFN=-1 或 1-9，那么正的实数输入值DREF 在这些情况下定义为参考距离 r_{dref}（通常设定为 $r_{dref} = r_e$）。然而，如果DREF 的输入值 ≤0.0，程序将在内部（迭代）确定 r_{ref} 值，使RFN(r) 的期待值对考虑的第一个振转能级恒等于 0。

如果IRFN≥10，RFN(r) 是由读入的某个已知径向函数（例如，偶极矩函数或跃迁矩函数）输入值并做内插（以及向外做外推）来定义的函数。读入和内插/外推由用于处理数值输入势函数（参见READ 声明 #5-8）的同一个子程序包PREPOT 来执行。这种情况下，DREF 是哑元，忽略READ 声明 #22，并且代码内部将设定MORDR= 1，DM(0) = 0.0，和DM(1) = 1.0。

#22. `IF((IABS(IRFN).LE.9).AND.(MORDR.GE.0)) READ(5,*) (DM(J), J= 0,MORDR)`

`DM(j):` RFN(r) 的幂级数的因子，用于定义全部期待值或矩阵元的实参 $M(r) = \sum_{j=0}^{\mathrm{MORDR}} \mathrm{DM}(j) \times \mathrm{RFN}(r)^j$。

如果期待值或矩阵元径向函数的实参由一组读入的点通过内插或外推来定义（IRFN≥10），使用和处理数值输入势函数的一样的读取顺序、选项和流程。这里大多数输入参数的定义基本等价于READ 声明 #5-8 中对应的定义。

#23. `READ(5,*) NRFN, RFLIM`

#24. `READ(5,*) NUSEF, ILRF, NCNF, CNNF`

#25. `READ(5,*) RFACTF, MFACTF`

#26. `READ(5,*) (XIF(I), YIF(I), I= 1,IRFN)`

`NRFN:` 读入的已知函数值 {XIF(i),YIF(i)} 的个数。

`RFLIM:` 对不在输入范围的外推施加的极限渐进值。

`NUSEF:` 指定如何做内插，而

`ILRF, NCNF` 和 `CNNF:` 在非常大的 r 处，定义外推方式（见READ 声明 #6 的注释）。

`RFACTF & MFACTF:` 分别把输入距离XIF(i) 和纵坐标YIF(i) 的单位转换到 Å 和期待值/矩阵元的实参 $M(r)$ 所需的任何单位（对偶极矩和跃迁矩函数是 Debye）。

对于矩阵元计算（|LXPCT|≥3），把势函数 1 的每个能级（由指定的READ 声明 #19 和 20 产生）与 NLEV2 个振动能级 v=IV2(i) 的所有转动能级进行耦合，允许的转动选择定则是 ΔJ =J2DL 到J2DU，步长J2DD（例如对 P & R 跃迁：J2DL= -1，J2DU= +1 & J2DD= +2）。如果NUMPOT= 2，还有势函数 2 的能级，但不加限制；但是如果NUMPOT= 1，矩阵元将把势函数 1 的能级与另外的能级进行耦合，为了避免重复，程序仅考虑从NLEV2 个振动能级（的转动子能级）到每个READ 声明 #18 & 19 产生的较低能级 (v'',J'') 的发射。AUTO2>0 的整数导致 LEVEL 对所有需要的能级自动产生测试特征值（最佳选项），因此只有其振动量子数的标记需要输入（READ 声明 #28a）。如果失败，设定AUTO2≤0 将对每个指定能级读入一个测试的纯振动能量GV2(i)（READ 声明 #28b）。

#27. `READ(5,*) NLEV2, AUTO2, J2DL, J2DU, J2DD`

#28a. `IF(AUTO2.GT.0) READ(5,*) (IV2(I),I= 1,NLEV2)`

#28b. `IF(AUTO2.GT.0) READ(5,*) (IV2(I),GV(I),I= 1,NLEV2)`

第五章　程序的升级

本章简要介绍 8.0 版本（2007 年 4 月）以来程序功能的变化。我感谢用户提出的一些建议，这已经包含在程序及其文档中。

5.1　到 8.2 版（2014 年 5 月 8 日）的升级

- 对于 EMO，MLR，或 $DELR$ 解析势函数，删除了用于不同指数多项式顺序 $r > r_e$ 和 $r \leq r_e$ 的 N_S 与 N_L 的区别，因为经验表明，通过引入移动的展开中心RREF=r_{ref}（通常 $r_{ref} > r_e$）和（对于 MLR 势函数）在指数多项式因子的函数中设定 $q \neq p$，可以得到等价或者更好的行为 [34, 46, 35, 42]。

- MLR 的指数因子函数可以选用 Pashov 型 [59, 60] 的三次样条函数表示 [39]。（未充分测试！）

- MLR，$DELR$，HPP 势函数的幂倒数函数尾部已做了推广，可以包含（可选的）“衰减函数”，如20-22式所示。该函数除了改进长程行为，还能改进非常短程的行为，有时还能得到更紧凑的（即，Nbeta 较小）势函数表达式 [35, 42]。

- 以上变化需要大量修改解析势函数部分的输入数据行，在READ 声明 #9 引入参数PPAR，QPAR，APSE，和Nbeta，并引入新的READ 声明 #10 和 11，其中包含新的参数RREF，rhoAB，IDF，和IDSTT。

致谢

我很高兴地感谢多伦多大学已故的 George Burns 教授的远见和鼓舞，自从 1966 年他就鼓动我从事这种计算研究工具的工作，和已故 Richard Bernstein 教授的恩典和财务支持，以及耐心地支持我漫步于该领域的 Wisconsin 大学 Madison 分校。我还必须感谢 R. N. Zare 在 1964 年开创性的 Franck-Condon 强度因子论文及有关报告 [1, 2, 3] 带给我的灵感和帮助。我还要感谢 J. Y. Seto 对开发最初版本的能级搜索子程序`ALF` 所提供的帮助，以及 J. Y. Seto 和 G. T. Kraemer 对开发原子量数据库子程序`MASSES` 所提供的帮助。我还感谢很多用户，他们的评论确认了一些错误，以及对代码的有用扩展给出了建议，特别要感谢 R. W. Field，P. F. Bernath，A. J. Ross，A. S. Dickinson，和 G. C. McBane。我在该领域的工作得到了加拿大自然科学和工程研究委员会（Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada）多年的慷慨支持。

参考文献

[1] R. N. Zare and J. K. Cashion. The IBM Share Program D2 NU SCHR 1072 for Solution of the Schrödinger Radial Equation. In J. W. Cooley, editor, *Necessary and Useful Modifications for its Use on an IBM 7090, University of California Lawrence Radiation Laboratory Report UCRL-10881*. 1963.

[2] R. N. Zare. University of California Lawrence Radiation laboratory Report UCRL-10925, 1963.

[3] R. N. Zare. *J. Chem. Phys.*, 40:1934, 1964.

[4] a) R. J. Le Roy. LEVEL 1.0, University of Wisconsin Theoretical Chemistry Institute Report WIS-TCI-429G, 1971; b) *ibid*, LEVEL 2.0, University of Waterloo Chemical Physics Research Report CP-58, 1976; c) *ibid*, LEVEL 3.0, CP-110, 1979; d) *ibid*, LEVEL 4.0, CP-230, 1983; e) *ibid*, LEVEL 5.0, CP-330, 1991; f) *ibid*, LEVEL 5.1, CP-330R, 1992; g) *ibid*, LEVEL 5.2, CP-330R^2, 1993; h) *ibid*, LEVEL 5.3, CP-330R^3, 1994; i) *ibid*, LEVEL 6.0, CP-555, 1995; j) *ibid*, LEVEL 6.1, CP-555R, 1996; k) *ibid*, LEVEL 7.0 – 7.7, CP-642 – 642R^3, 2000–2005; l) *ibid*, LEVEL 8.0, CP-663, 2007–2014.

[5] R. J. Le Roy. LEVEL 8.2: *A Computer Program for Solving the Radial Schrödinger Equation for Bound and Quasibound Levels* . Technical report, University of Waterloo Chemical Physics Research Report CP-663, 2014. see http://leroy.uwaterloo.ca/programs/.

[6] J. K. G. Watson. *J. Mol. Spectrosc.*, 80:411, 1980.

[7] J. W. Cooley. *Math. Computations*, 15:363, 1961.

[8] J. Cashion. *J. Chem. Phys.*, 39:1872, 1963.

[9] R. J. Le Roy and R. B. Bernstein. *J. Chem. Phys.*, 54:5114, 1971.

[10] R. J. Le Roy and W.-K. Liu. *J. Chem. Phys.*, 69:3622, 1978.

[11] J. N. L. Connor and A. D. Smith. *Mol. Phys.*, 43:397, 1981.

[12] Y. Huang and R. J. Le Roy. J. Chem. Phys. 119:7398, 2003; erratum: *ibid* 126:169904, 2007.

[13] K. Smith. *The Calculation of Atomic Collision Processes*, chapter 4. Wiley-Interscience, New York, 1971.

[14] M. S. Child. *Semiclassical Mechanics with Molecular Applications*. Clarendon Press, Oxford, 1991.

[15] P.-O. Lẅdin. *An Elementary Iteration-Variation Procedure for Solving the Schrödinger Equation, Technical Note No. 11*. Quantum Chemistry Group, Uppsala University, Uppsala, Sweden, 1958.

[16] J.-S. Cho and R. Le Roy. in 70th International Symposium on Molecular Spectroscopy (University of Illinois, Urbana-Champaign, Illinois, 2014), paper MG02.

[17] M. Hehenberger, P. Froelich, and E. Brändas. *J. Chem. Phys.*, 65:4559, 1976.

[18] M. Hehenberger. *J. Chem. Phys.*, 67:1710, 1977.

[19] R. J. Le Roy. *Comp. Phys. Comm.*, 52:383, 1989.

[20] R. J. Le Roy and G. T. Kraemer. BCONT 2.2: *A Computer Program for Calculating Bound→Continuum Transition Intensities for Diatomic Molecules* . Technical report, University of Waterloo Chemical Physics Research Report CP-650R^2, 2004. see http://leroy.uwaterloo.ca/programs/.

[21] G. Herzberg. *Spectra of Diatomic Molecules*. Van Nostrand, Toronto, 1950.

[22] J. Tellinghuisen. *J. Mol. Spectrosc.*, 122:455, 1987.

[23] J. M. Hutson. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 14:851, 1981.

[24] P. F. Bernath. *Spectra of Atoms and Molecules, 2nd ed.* Oxford University Press, New York, 2005.

[25] A. Hansson and J. K. G. Watson. *J. Mol. Spectrosc.*, 233:169, 2005.

[26] J. Y. Seto. Direct Fitting of Analytic Potential Functions to Diatomic Molecule Spectroscopic Data. Master's thesis, Department of Chemistry, University of Waterloo, 2000.

[27] A. A. Šurkus, R. J. Rakauskas, and A. B. Bolotin. *Chem. Phys. Lett.*, 105:291, 1984.

[28] J. L. Dunham. *Phys. Rev.*, 41:721, 1932.

[29] G. Simons, R. G. Parr, and J. M. Finlan. *J. Chem. Phys.*, 59:3229, 1973.

[30] J. F. Ogilvie. *Proc. Roy. Soc. (London) A*, 378:287, 1981.

[31] E. G. Lee, J. Y. Seto, T. Hirao, P. F. Bernath, and R. J. Le Roy. *J. Mol. Spectrosc.*, 194:197, 1999.

[32] J. Y. Seto, Z. Morbi, F. Charron, S. K. Lee, P. F. Bernath, and R. J. Le Roy. *J. Chem. Phys.*, 11756:110, 1999.

[33] Y. Huang. Determining Analytical Potential Energy Functions of Diatomic Molecules by Direct Fitting. Master's thesis, Department of Chemistry, University of Waterloo, 2001.

[34] R. Le Roy, N. Dattani, J. Coxon, A. Ross, P. Crozet, and C. Linton. *J. Chem. Phys.*, 131:204309, 2009.

[35] R. Le Roy, C. Haugen, J. Tao, and H. Li. *Mol. Phys.*, 109:435, 2011.

[36] W. Hua. *Phys. Rev. A*, 42:2524, 1990.

[37] R. Le Roy and R. Henderson. *Mol. Phys.*, 105:663, 2007.

[38] P. Hajigeorgiou and R. Le Roy. *J. Chem. Phys.*, 112:3949, 2000.

[39] J. Tao, R. Le Roy, and A. Pashov. in 65th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy (Columbus, Ohio, 2010), p. paper MG07.

[40] R. Le Roy, Y. Huang, and C. Jary. *J. Chem. Phys.*, 125:164310, 2006.

[41] T. Yukiya, N. Nishimiya, Y. Samajima, K. Yamaguchi, M. Suzuki, C. Boone, I. Ozier, and R. J. Le Roy. *J. Mol. Spectrosc.*, 283:32, 2013.

[42] R. Henderson, A. Shayesteh, J. Tao, C. Haugen, P. Bernath, and R. Le Roy. *J. Phys. Chem. A*, 117:13373, 2013.

[43] C. Douketis, J. M. Hutson, B. J. Orr, and G. Scoles. *Mol. Phys.*, 52:763, 1984.

[44] K. T. Tang and J. P. Toennies. *J. Chem. Phys.*, 80:3726, 1984.

[45] W. Gunton, M. Semczuk, N. Dattani, , and K. Madison. *Phys. Rev. A*, 88:062510, 2013.

[46] N. Dattani and R. Le Roy. *J. Mol. Spectrosc.*, 268:199, 2011.

[47] M. Semczuk, X. Li, W. Gunton, M. Haw, N. Dattani, J. Witz, A. Mills, D. Jones, and K. Madison. *Phys. Rev. A*, 87:052505, 2013.

[48] J. Hepburn, G. Scoles, and R. Penco. *Chem. Phys. Lett.*, 36:451, 1975.

[49] C. Douketis, G. Scoles, S. Marchetti, M. Zen, and A. J. Thakkar. *J. Chem. Phys.*, 76:3057, 1982.

[50] C. Samuelis, E. Tiesinga, T. Laue, M. Elbs, H. Knöckel, and E. Tiemann. *Phys. Rev. A*, 63:012710, 2000.

[51] R. J. Le Roy. *Molecular Spectroscopy*, volume 1, Specialist Periodical Report 3, pages 113–176. Chemical Society of London, London, 1973.

[52] R. J. Le Roy. *J. Chem. Phys.*, 73:6003, 1980.

[53] R. J. Le Roy. *J. Chem. Phys.*, 101:10217, 1994.

[54] R. J. Le Roy and Y. Huang. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 591:175, 2002.

[55] P. Mohr, B. Taylor, and D. Newell. *Rev. Mod. Phys.*, 84:1527, 2012.

[56] M. Wang, G. Audi, A. Wapstra, F. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. *Chin. Phys. C*, 36:1603, 2012.

[57] J. Y. Seto, R. J. Le Roy, J. Vergès, and C. Amiot. *J. Chem. Phys.*, 113:3067, 2000.

[58] R. J. Le Roy. *J. Mol. Spectrosc.*, 194:189, 1999.

[59] A. Pashov, W. Jastrzębski, and P. Kowalczyk. *Comp. Phys. Comm.*, 128:622, 2000.

[60] A. Pashov, W. Jastrzębski, and P. Kowalczyk. *J. Chem. Phys.*, 113:6624, 2000.

[61] S. D. Peyerimhoff and R. J. Buenker. *Chem. Phys.*, 57:279, 1981.

[62] R. J. Le Roy, D. R. T. Appadoo, K. Anderson, A. Shayesteh, I. E. Gordon, and P. F. Bernath. *J. Chem. Phys.*, 123:204304, 2005.

[63] D. Barrow, M. Slaman, and R. A. Aziz. *J. Chem. Phys.*, 91:6348, 1991.

[64] O. Allard, A. Pashov, H. Knöckel, and E. Tiemann. *Phys. Rev. A*, 66:042503:1, 2002.

附录：程序的结构，输入范例，样本数据和输出文件，以及耗时

A. 程序的结构

这一部分列出了 LEVEL 使用的各个子程序的名称和功能概述，并表明了层次结构。特别是列表中的缩进级别表明了子程序之间的调用关系；除非另外说明，否则每个子程序专由前面较低缩进级别的例程调用。

LEVEL 主程序，读取输入数据和指令，调用势函数的准备，特征函数的计算，以及重叠积分例程。

MASSES： 这是数据子程序，包含所有稳定原子同位素的准确原子量以及其它性质。对于一般情况，它的出现可以避免需要用户查找和把精确的粒子质量输入到输入数据文件中。此外还由POTGEN 调用，用于定义质量换算的 BOB 函数。

ALF： 对任何光滑的单最小值，平缓态或者双最小值势函数，ALF（Automatic Level Finder；自动能级发现程序）通过多次调用SCHRQ（见下）来确定从 $v = 0$ 直到某个最大 v（由输入参数KVMAX 指定）的所有能级的振动能量。如果只发现少于指定数目的能级，会打印警告信息。

SCECOR： 使用一阶半经典估计的 $(v+1/2)$ 和 $dG(v)/dv$，有时候还用更暴力的方法，来产生“下一个”感兴趣能级的试探特征值。

SCHRQ： 解薛定额方程，确定最接近输入试探能量的振动能级的特征值和（单位归一化）特征函数。

QBOUND： 对准束缚能级（位于势渐近线之上势垒之下），在第三个折线点应用 Airy 函数边界条件，向内开始进行能级的波函积分 [9, 10]。

WIDTH： 计算准束缚能级的隧道预离解寿命或宽度 [10, 11, 12]。

LEVQAD： 由WIDTH 调用，计算近折线点对于从势阱到贯穿势垒的半经典积分的贡献，用于计算预离解速率。

CDJOEL： 计算7式的双原子分子离心畸变常数。这需要的输入是有效（离心畸变，如果有的话）径向势函数，以及要计算能级的特征值和特征函数（由SCHRQ 计算）。

LEVXPC： 对于指定距离坐标或（内插）径向函数RFN(r) 的幂，计算需要的对角期待值（见第四章的READ 声明 #19）。

MATXEL： 对于指定径向函数或距离坐标的幂，计算需要的非对角矩阵元，以及辐射寿命或爱因斯坦辐射系数 $\mathcal{A}$ [s^{-1}]。

PREPOT： 检查读入参数的子程序，这些参数用于定义势函数和由距离数组输入指定的 N 个距离生成所需的势函数数组。

GENINT： 使用分段多项式或三次样条函数，对一组读入的折线点内插，在均匀分布的径向网格上产生势函数数组，用于SCHRQ。必要的话，在给定点的范围以外使用解析函数做外推（见READ 声明 #6 的参数ILR 的选项）。

PLYINTRP： 对给定点的数组分段执行多项式内插，返回在指定点的函数值及其（如果需要的话）导数。它用于GENINT，对NUSE> 0 情况的势函数进行内插。该例程还用于SPLINT，定义内插区域内、外端点 R=XI(1) 和XI(NTP) 的一阶导数。

SPLINT： 调用子程序SPLINE，通过NTP 个给定的折线点，产生用于定义三次样条的 4×(NTP-1) 个因子，接下来使用这些因子在指定的积分格点产生需要的内插函数值。

SPLINE： 通过NTP 个给定的折线点产生定义三次样条函数的因子。

POTGEN： 对由输入参数IPOTL 指定的各种解析势函数（见READ 声明 #9），在指定的径向格点读入定义这些势函数的参数，并产生所需的势函数值的数组。如果还包含 BOB 校正函数，还要读入定义校正函数的参数，并把校正函数并入到有效绝热势函数上，用于SCHRQ。

DAMPF： 产生21和22式的衰减函数，用于定义 MLR，$DELR$，和 HPP 势能函数的尾部。

AF3X3LEV： 执行 3×3 对角化，用于定义 Li_2 $c1^3\Sigma_g^+$ 态的 MLR 势函数的长程尾部 [46]。

LKoef： Asen Pashov 的子程序，用于产生Nbeta×Nbeta 因子数组，，定义他的样条“基函数”[59]。

Scalc： Pashov 采用的产生 $S_m(x)$“基函数”的函数子程序，用于生成样条函数的值。

ludcmp： LKoef 使用的一个子程序。

B. 输入范例

程序的运行时间完全依赖于计算任务的复杂程度和使用计算机的类型；CPU 耗时从不足一秒到几分钟。本附录介绍了典型例子的示例数据文件和输出结果，举例说明了程序应用中的一些问题类型。在一台有些老的 UNIX 工作站上，示例 1 中四个例子需要 0.125 秒 CPU 时间，示例 2 中五个例子需要 1.28 秒，示例 3 的“正式”计算需要 23.71 秒。

示例 1： 这个数据文件（见附录 C）由四个单独的数据集构成，说明了程序的各种功能，包括把几个示例的输入数据放到同一个文件里，在单独一个运行中处理几个独立的问题。输出的结果列在附录 D 中。

a) 对于 Lennard-Jones(12,6) 势函数，寻找所有的振动能级并计算相应的离心畸变常数值。这是一个具有虚拟粒子质量的模型体系，所以质量和所选的粒子名称“L1”和“L2”由READ 声明 #2 输入。

b) 对于和示例 1a) 相同的简单模型 Lennard-Jones(12,6) 势函数，计算所有可能的红外矩阵元，包括 $v \leq 2$ 和 $J(upper) \leq 1$ 的能级。

c) 对于和示例 1a) 相同的模型 Lennard-Jones(12,6) 势函数，定位 $J = 18$ 离心畸变势函数的所有（四个）振动能级。这显示程序可以对离解极限之上有势垒（这是离心的来源）的势函数自动寻找所有振动能级。为了说明特征值收敛流程的迭代过程，本例子调用了SCHRQ 中的最高打印级别（通过设置IWR = 3，见READ 声明 #17）。因为程序内部逻辑巧合，本例中的每个能级的收敛细节出现两次（虽然第二次只需要一个迭代）。

d) 演示程序的能力，对于 Cl_2 分子 $^3\Pi_g$ 态的从头势函数 [61]，包括确定双极小势函数的特征值，寻找振动能级 v= 56-80 的特征值，以及计算 r 各种幂的期待值。这些能级中的最低能级位于所有能级属于外部深势阱的区域，而最高能级位于分开两势阱的能垒之上。输出的期待值表明，随着能量增加，波函振幅在两个势阱之间来回跳跃。本例示范了程序（特别是其自动能级发现子程序ALF）有自动寻找双最小势函数任意能级的能力。

示例 2： 提供了计算特征值的示范性的输入数据文件，使用了第2.5节中的一些解析势函数（附录 E）。

a) 示范对“扩展的 Morse 振荡”（EMO）势函数的应用，本例从参考文献 [62] 的“$EMO_3(7)$”势函数计算 ^{109}AgD 的特征值，该势函数是通过把 ^{107}AgH 作为“参考同位素”，进行同位素组合分析得到的。

b) 示范对“Morse/长程”（MLR）势函数的应用，并把 Born-Oppenheimer 分解（BOB）贡献加入到径向和离心势函数中。本例用解析 MLR 势函数和 BOB 校正函数计算了 ^{24}MgD 基态能级的性质，势函数是把 ^{24}MgH 作为“参考同位素”，通过对 MgH 体系的数据进行同位素组合分析得到的（参见文献 [42]）。注意在这种情况下，转动常数的计算基于加入30式 BOB 校正函数的离心势函数。

c) 这是一个使用 $DELR$ 势函数形式进行计算的例子，势函数在文献 [12] 中引入。这里的 $DELR$ 势函数与文献报道中的势函数并不严格相同，因为当前版本的代码对于 $DELR$ 形式的指数多项式在 $r \le r_e$ 和 $r > r_e$ 区域不允许有不同的级次。但是对于 Li_2 到 $B^1\Pi_u$ 态的发射数据，该代码仍然提供了非常好的描述。

d) 用 Aziz 等报道的广义 HFD 函数 [63]，对 $^{20}Ne^{84}Kr$ 的基态 $X^1\Sigma^+$ 进行本计算。

e) 用 Aziz 等报道的“X-展开”或 HPP 多项式势函数 [64]，对 Ca_2 的 $X^1\Sigma_g^+$ 态进行本计算。注意，文献 [64] 报道的 18 位数字的多项式展开因子（近似）舍入为本程序的 13 位数字，显示对结果没有重要影响。

示例 3： 这是只列出示例的谱线列表的数据集合，“正式运行”是两个逐点势函数（`READ` 声明 #1 的`NUMPOT`=2，`READ` 声明 #5 的`NTP`> 0），用于预测 Br_2 分子 $B(^3\Pi_{0^+u}) - X(1\Sigma_g^+)$ 光谱大约 267555 条线的跃迁能和爱因斯坦辐射系数。本例还利用了`NLEV1`< 0 选项的功能，自动寻找给定势函数的前 |`NLEV1`| + 1 个能级。还演示了`NJM`> 0 选项的使用，对每个 v 寻找多个（或所有）转动子能级，并在两个不同电子态之间的跃迁计算中应用转动选择定则。输入数据文件在附录 F 列出，部分通道 6 的输出在附录 G 中，部分通道 8 的输出在附录 H 中。

本例最大的一部分输出包括约 267555 个跃迁的跃迁频率和爱因斯坦 $\mathcal{A}$ 因子的列表（产生该长度的谱线列表），写到通道 8 中。这个输出的一小部分在附录 H 中显示。由于通道 6 相应的标准输出同样相对冗长（约 3221 行），附录 G 的列表内容同样作了截断。然而，这个输出演示了一些程序产生的警告信息（通常并不严重）。特别是在截断的附录 G 中，对于 v'=34，J'=100-103，警告发生在准束缚能级的`RMAX` 小于最外的折线点，程序会试图在这里应用 Airy 函数边界条件（见第2.2节）。该警告在`SCHRQ` 对相应特征值进行收敛的每次迭代打印；如它所指出的，本例中的 Airy 函数边界条件被3式使用的 WKB 波函初始化代替。打印的第二类警告（“`... so tunneling calculation uses...`”）在能级特征值的收敛之后，在该情况下的能垒宽度计算中，对从范围终点到实际最外折线点之间的部分通过近似估算指数积分进行提示。然而一旦发生这种情况，相应的隧穿能级宽度通常很小，尽管结果预测的宽度可能略微有些误差，但计算的特征值通常相当准确。

一种不同类型的问题产生在“`SCHRQ has a convergence problem...`”和“`CAUTION for...`”开始的行中，本例中见于 v=34，J=127。这是该 v 量子数最高的准束缚能级，它位于非常接近离心势垒最高处，从两个不同的起点经过 30 次迭代后，Airy 函数边界条件对这个特殊能级不能完全收敛到`EPS`。但是即使不考虑这个问题，最后的特征值变化“`DE= 1.63D-03`” cm^{-1} 和这个隧穿预离解能级的宽度（`FWHM`= 0.90 cm^{-1}）相比非常小，所以未完全收敛对结果特征值精度的真实影响可以忽略。

另外一种警告信息见于 J= 93 时的 v= 40 能级（“`... find onee turn point...`”）。当寻找超过（离心）势垒最大值顶端的更高转动子能级时，它就会出现。这种情况下，代码多次尝试在势垒边界稍下方放置一个能级，步骤有时失败（如本例），有时成功。

C. 示例 1a)–1d) 的输入数据文件

注意，输入数据文件每一行“%”号后面的内容是标注变量的注释，被程序忽略。

```
 0 30  0 30   0  1                                % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
 'L1' 30.34373256D0                               % NAME1 MASS1
 'J2' 30.34373256D0                               % NAME2 MASS2
'Case 1.a: For a model L.J.(12,6) get all vib. levels and their CDCs'
 0.0020  0.6  20.  1.d-6                          % RH RMIN RMAX EPS
 0  0  0  0.D0                                    % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 1  12 6  0  0  0                                 % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
  1000.d0   1.d0  1.d0                            % DSCM REQ Rref
-999  1  1  -1  0 1  -1 0                         % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 0                                             % IV(1) IJ(1)

 0 30  0 30   0  1                                % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
 'L1' 30.34373256D0                               % NAME1 MASS1
 'J2' 30.34373256D0                               % NAME2 MASS2
'Case 1.b: For same model L.J.(12,6) get radial matrix elements for v < 3'
 0.0020  0.6  20.   1.d-6                         % RH RMIN RMAX EPS
 0  0  0  0.D0                                    % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 1  12 6  0  0  0                                 % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
  1000.d0   1.d0  1.d0                            % DSCM REQ Rref
-2  1  0  5  1 1  -1 0                            % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 0                                             % IV(1) IJ(1)
 4 -1  1.D0                                       % MORDR IRFN RREF
 1.d0  -0.2d0 0.03d0 -0.004d0 0.0005d0            % {DM(j)}
 3  1  -1 +1 2                                    % NLEV2 AUTO2 J2DL J2DU J2DD
  0  1  2                                         % IV2(1) IV2(2) IV2(3)

 -1 0  -1 0   0   1                               % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
 'L1' 30.34373256D0                               % NAME1 MASS1
 'J2' 30.34373256D0                               % NAME2 MASS2
'Case 1.c: For the same L.J.(12,6), find levels of potential with a barrier'
 0.0020  0.6  20.  1.d-6                          % RH RMIN RMAX EPS
 0  0  0  0.D0                                    % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 1  12 6  0  0  0                                 % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
  1000.d0   1.d0  1.d0                            % DSCM REQ Rref
-999  1  0  -1  0 1   3  0                        % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 18                                            % IV(1) IJ(1)

17 35  17 35   0   1                              % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 1.d:  Levels of a pointwise double-minimum potential for 3(PI)g Cl2'
 0.001  1.6  10.   1.d-06                         % RH RMIN RMAX EPS
 29  0  0  95440.D0                               % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 0 0  2  1  0.D5                                  % NUSE IR2 ILR NCN CNN
 0.5291772108D0  8065.5444D0  0.d0                % RFACT EFACT VSHIFT
  3.34 10.608 3.40 9.683  3.43 9.221  3.49 8.758
  3.57 8.295  3.66 8.132  3.76 8.051  3.86 8.132  3.94 8.268
  4.03 8.350  4.17 8.595  4.26 8.704  4.31 8.758  4.46 8.432
  4.56 8.134  4.66 7.887  4.80 7.615  4.91 7.425  5.00 7.343
  5.17 7.125  5.37 6.962  5.51 6.908  5.66 6.880  5.80 6.908
  5.94 6.989  6.00 7.044  6.20 7.125  6.40 7.261  6.60 7.425
 22  1  0  1  0 1   -1 0                           % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
```

```
 56 0  57 0  58 0  59 0  60 0  61 0  62 0  63 0  64 0  65 0  66 0  67  0
 68 0  69 0  70 0  72 0  72 0  73 0  74 0  75 0  76 0  77 0  78 0  80 0
3  0  0.D0                                          % MORDR IRFN RREF
 1.d0  -2.d-1  3.d-2  -4.d-3                        % {DM(j)}
```

D. 示例 1a)–1d) 的通道 6 输出文件

```
Case 1.a: For a model L.J.(12,6) get all vib. levels and their CDCs
================================================================================
 Generate   ZMU= 15.17186628000(u)   &   BZ= 8.999999997D-01((1/cm-1)(1/Ang**2))
          from atomic masses:  30.34373256000  &   30.34373256000(u)
 Integrate from  RMIN=  0.600  to  RMAX=  20.00  with mesh  RH= 0.002000(Angst)

 Potential #1 for L1( 30)-J2( 30)
 ================================
 State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=      0.0000(cm-1)

 Lennard-Jones(12, 6) potential with   De=  1000.000(cm-1)   Re =  1.000000(A)
 ---------------------------------------------------------------------------
 Calculate properties of the single potential described above
 Potential-1 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN

 Eigenvalue convergence criterion is   EPS= 1.0D-06(cm-1)
 Airy function at 3-rd turning point is quasibound outer boundary condition

 State-1 electronic angular momentum  OMEGA= 0
         yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2
 For  J=  0, find the first 400 levels of Potential-1   with   VLIM=      0.000

 ALF finds the highest calculated level is  E(v=  6)=-0.77249285

 E(v=  0, J=  0)=  -811.519   Bv=  1.0540426  -Dv= -4.1381D-05   Hv= -6.5120D-09
          Lv= -1.9007D-12   Mv= -7.2230D-16   Nv= -3.1926D-19   Ov= -1.5585D-22
 E(v=  1, J=  0)=  -507.170   Bv=  0.9332450  -Dv= -6.0794D-05   Hv= -1.4820D-08
          Lv= -6.5533D-12   Mv= -3.7208D-15   Nv= -2.4359D-18   Ov= -1.7523D-21
 E(v=  2, J=  0)=  -287.838   Bv=  0.8013476  -Dv= -9.2177D-05   Hv= -3.5187D-08
          Lv= -2.3947D-11   Mv= -2.0879D-14   Nv= -2.1041D-17   Ov= -2.3384D-20
 E(v=  3, J=  0)=  -141.503   Bv=  0.6566553  -Dv= -1.4627D-04   Hv= -9.2303D-08
          Lv= -1.0432D-10   Mv= -1.5291D-13   Nv= -2.6179D-16   Ov= -4.9802D-19
 E(v=  4, J=  0)=   -54.890   Bv=  0.4974391  -Dv= -2.4978D-04   Hv= -2.9569D-07
          Lv= -6.5212D-10   Mv= -1.9135D-12   Nv= -6.6507D-15   Ov= -2.5885D-17
 E(v=  5, J=  0)=   -13.337   Bv=  0.3221808  -Dv= -4.9470D-04   Hv= -1.4933D-06
          Lv= -9.1824D-09   Mv= -7.7465D-11   Nv= -7.8195D-13   Ov= -8.8619D-15
 E(v=  6, J=  0)= -0.7724928  Bv= 1.2900D-01  -Dv= -1.6478D-03   Hv= -3.8715D-05
          Lv= -2.0424D-06   Mv= -1.4479D-07   Nv= -1.1986D-08   Ov= -1.0942D-09

 Find   7 Potential-1 vibrational levels with  J=  0
     v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)
   --------------    --------------    --------------    --------------
```

```
     0   -811.5192     2   -287.8379     4    -54.8902     6     -0.7725
     1   -507.1696     3   -141.5034     5    -13.3368

 An  n= 6  N-D theory extrapolation from last 2 levels implies   vD =   6.631
 ==============================================================================


Case 1.b: For same model L.J.(12,6) get radial matrix elements for v < 3
==============================================================================
 Generate   ZMU= 15.17186628000(u)   &   BZ= 8.999999997D-01((1/cm-1)(1/Ang**2))
          from atomic masses:  30.34373256000  &   30.34373256000(u)
 Integrate from  RMIN=  0.600  to  RMAX=  20.00  with mesh  RH= 0.002000(Angst)

 Potential #1 for L1( 30)-J2( 30)
 ================================
 State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=      0.0000(cm-1)

 Lennard-Jones(12, 6) potential with   De=  1000.000(cm-1)   Re =  1.000000(A)
 ------------------------------------------------------------------------------

 Calculate properties of the single potential described above
 Potential-1 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN

 Eigenvalue convergence criterion is   EPS= 1.0D-06(cm-1)
 Airy function at 3-rd turning point is quasibound outer boundary condition

 State-1 electronic angular momentum  OMEGA= 0
         yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2
 For  J=  0, find the first   3 levels of Potential-1   with   VLIM=      0.000

   and automatically increment  J  in steps of  1 to a maximum value of   1

 Matrix element argument expansion variable is:    X = (r - DREF)/DREF
     where reference length is held fixed at   DREF = 1.0000000000(Angstroms)
 Coefficients of expansion for radial matrix element/expectation value argument:
       1.000000D+00 -2.000000D-01  3.000000D-02 -4.000000D-03  5.000000D-04

 Using the rotational selection rule:  delta(J)= -1 to 1 with increment 2
   calculate matrix elements for coupling to the   3 vibrational levels of
   Potential-2:   v =   0   1   2
 ------------------------------------------------------------------------------
 Coupling   E(v=  0, J=  1)=   -809.4112   to   E(v=  0, J=  0)=   -811.5192
     Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.9999997392   <X** 1>=  0.0315663983
      <X** 2>=  0.0043724231   <X** 3>=  0.0004274505   <X** 4>=  0.0000681864
 FCF= 1.0000D+00   <M>= 9.93816D-01   d(E)=     -2.11   A(Einst)= 9.6706D-07 s-1
 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++

 For vibrational level  v =  0   of Potential-1
   J      E         J      E         J      E         J      E         J      E
 --------------  --------------  --------------  --------------  --------------
   0   -811.519    1   -809.411
 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
 Coupling   E(v=  1, J=  0)=   -507.1696   to   E(v=  0, J=  1)=   -809.4112
```

```
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.0007038706   <X** 1>=  0.0555644965
     <X** 2>=  0.0061799007   <X** 3>=  0.0011668795   <X** 4>=  0.0002051809
FCF= 4.9543D-07   <M>=-1.02282D-02   d(E)=   -302.24   A(Einst)= 9.0586D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  1, J=  1)=   -505.3034   to   E(v=  0, J=  0)=   -811.5192
    Moment matrix elements:   <X** 0>= -0.0007036644   <X** 1>=  0.0554599642
     <X** 2>=  0.0061672593   <X** 3>=  0.0011650604   <X** 4>=  0.0002048749
FCF= 4.9514D-07   <M>=-1.16152D-02   d(E)=   -306.22   A(Einst)= 4.0496D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  1, J=  1)=   -505.3034   to   E(v=  0, J=  2)=   -805.1964
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.0014096830   <X** 1>=  0.0556429498
     <X** 2>=  0.0062065908   <X** 3>=  0.0011721096   <X** 4>=  0.0002064159
FCF= 1.9872D-06   <M>=-9.53729D-03   d(E)=   -299.89   A(Einst)= 5.1293D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  1, J=  1)=   -505.3034   to   E(v=  1, J=  0)=   -507.1696
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.9999989173   <X** 1>=  0.1072309514
     <X** 2>=  0.0227481313   <X** 3>=  0.0044941830   <X** 4>=  0.0010331538
FCF= 1.0000D+00   <M>= 9.79218D-01   d(E)=     -1.87   A(Einst)= 6.5155D-07 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++

For vibrational level  v =  1   of Potential-1
  J      E         J      E         J      E         J      E         J      E
--------------  --------------  --------------  --------------  --------------
  0   -507.170    1   -505.303
+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  0)=   -287.8379   to   E(v=  0, J=  1)=   -809.4112
    Moment matrix elements:   <X** 0>= -0.0001445686   <X** 1>= -0.0146868141
     <X** 2>=  0.0021494006   <X** 3>=  0.0006270858   <X** 4>=  0.0002038462
FCF= 2.0900D-08   <M>= 2.85487D-03   d(E)=   -521.57   A(Einst)= 3.6268D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  0)=   -287.8379   to   E(v=  1, J=  1)=   -505.3034
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.0012364336   <X** 1>=  0.0838602021
     <X** 2>=  0.0215270661   <X** 3>=  0.0065378301   <X** 4>=  0.0019424342
FCF= 1.5288D-06   <M>=-1.49150D-02   d(E)=   -217.47   A(Einst)= 7.1749D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  1)=   -286.2356   to   E(v=  0, J=  0)=   -811.5192
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.0001452962   <X** 1>= -0.0147714152
     <X** 2>=  0.0021295981   <X** 3>=  0.0006226650   <X** 4>=  0.0002028174
FCF= 2.1111D-08   <M>= 3.16108D-03   d(E)=   -525.28   A(Einst)= 1.5140D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  1)=   -286.2356   to   E(v=  0, J=  2)=   -805.1964
    Moment matrix elements:   <X** 0>= -0.0002889435   <X** 1>= -0.0146592358
     <X** 2>=  0.0021551720   <X** 3>=  0.0006307829   <X** 4>=  0.0002051064
FCF= 8.3488D-08   <M>= 2.70514D-03   d(E)=   -518.96   A(Einst)= 2.1384D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  1)=   -286.2356   to   E(v=  1, J=  0)=   -507.1696
    Moment matrix elements:   <X** 0>= -0.0012355622   <X** 1>=  0.0834456954
     <X** 2>=  0.0214393061   <X** 3>=  0.0065170119   <X** 4>=  0.0019370216
FCF= 1.5266D-06   <M>=-1.73066D-02   d(E)=   -220.93   A(Einst)= 3.3767D-04 s-1
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
Coupling   E(v=  2, J=  1)=   -286.2356   to   E(v=  1, J=  2)=   -501.5723
    Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.0024778195   <X** 1>=  0.0841137737
     <X** 2>=  0.0216303217   <X** 3>=  0.0065743346   <X** 4>=  0.0019558701
```

```
 FCF= 6.1396D-06   <M>=-1.37213D-02   d(E)=   -215.34   A(Einst)= 3.9306D-04 s-1
 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
 Coupling   E(v=  2, J=  1)=   -286.2356   to   E(v=  2, J=  0)=   -287.8379
     Moment matrix elements:   <X** 0>=  0.9999970447   <X** 1>=  0.2089561346
      <X** 2>=  0.0661950523   <X** 3>=  0.0214010286   <X** 4>=  0.0074711130
 FCF= 9.9999D-01   <M>= 9.60110D-01   d(E)=     -1.60   A(Einst)= 3.9644D-07 s-1
 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++

 For vibrational level  v =  2   of Potential-1
   J      E         J      E         J      E         J      E         J      E
 --------------  --------------  --------------  --------------  --------------
   0   -287.838    1   -286.236
 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++

 Find   3 Potential-1 vibrational levels with  J=  0
     v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)
    --------------    --------------    --------------    --------------
     0   -811.5192     1   -507.1696     2   -287.8379

 An  n= 6  N-D theory extrapolation from last 2 levels implies   vD =   6.812
 ==============================================================================


Case 1.c: For the same L.J.(12,6), find levels of potential with a barrier
==============================================================================
 Generate   ZMU= 15.17186628000(u)   &   BZ= 8.999999997D-01((1/cm-1)(1/Ang**2))
          from atomic masses:  30.34373256000  &   30.34373256000(u)
 Integrate from  RMIN=  0.600  to  RMAX=  20.00  with mesh  RH= 0.002000(Angst)

 Potential #1 for L1(  0)-J2(  0)
 ================================
 State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=      0.0000(cm-1)

 Lennard-Jones(12, 6) potential with   De=  1000.000(cm-1)   Re =  1.000000(A)
 ---------------------------------------------------------------------------

 Calculate properties of the single potential described above
 Potential-1 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN

 Eigenvalue convergence criterion is   EPS= 1.0D-06(cm-1)
 Airy function at 3-rd turning point is quasibound outer boundary condition

 State-1 electronic angular momentum  OMEGA= 0
         yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2
 For  J= 18, find the first 400 levels of Potential-1   with   VLIM=      0.000


 Solve for  v=  0   J= 18   ETRIAL= -4.6535526D+02  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -4.6535526D+02  4.87D-03  1.37D+02  9.86D+00    258   1.11  8.3D-27  2.5D-13    2.54     1  178
   2 -4.5549824D+02 -4.11D-04  1.72D+02 -6.65D-01    260   1.12  1.0D-26  3.6D-13    2.54     1  177
   3 -4.5616312D+02 -2.49D-06  1.70D+02 -4.08D-03    260   1.12  9.9D-27  3.5D-13    2.54     1  177
```

```
   4 -4.5616720D+02 -9.36D-11  1.70D+02 -1.53D-07    260   1.12  9.9D-27  3.5D-13    2.54     1  177
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  0,J= 18)=  -456.1672   4 Iter  R(M)=  1.12  WF(NBEG=    52)/WF(M)= 9.9D-27
                                     INNER= 0      WF(NEND=   799)/WF(M)= 3.5D-13
 Single well  ICOR= 0:  E(v=  0,J= 18)=   -456.17  v(SC)=   0.002  dGdv= 308.355
                                         (vD-v)=    5.0609   E(next)= -2.0473D+02

 Solve for  v=  1   J= 18   ETRIAL= -2.0472865D+02  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -2.0472865D+02  5.76D-03  1.62D+02  9.86D+00    328   1.25 -1.7D-26  3.9D-13    3.20     1  164
   2 -1.9487134D+02 -7.70D-04  2.30D+02 -9.31D-01    332   1.26 -2.2D-26  4.8D-13    3.23     1  164
   3 -1.9580231D+02 -1.04D-05  2.17D+02 -1.33D-02    331   1.26 -2.1D-26  4.5D-13    3.23     1  164
   4 -1.9581562D+02 -1.98D-09  2.17D+02 -2.54D-06    331   1.26 -2.1D-26  4.5D-13    3.23     1  164
   5 -1.9581563D+02 -1.33D-15  2.17D+02 -1.71D-12    331   1.26 -2.1D-26  4.5D-13    3.23     1  164
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  1,J= 18)=  -195.8156   5 Iter  R(M)=  1.26  WF(NBEG=    51)/WF(M)=-2.1D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=  1066)/WF(M)= 4.5D-13
 Single well  ICOR= 0:  E(v=  1,J= 18)=   -195.82  v(SC)=   1.003  dGdv= 213.103
                                         (vD-v)=    3.6578   E(next)= -3.5663D+01

 Solve for  v=  2   J= 18   ETRIAL= -3.5662990D+01  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -3.5662990D+01  6.66D-03  1.74D+02  1.06D+01    414   1.43  2.0D-26  7.2D-13    4.94     1  159
   2 -2.5053068D+01 -1.48D-03  3.06D+02 -1.35D+00    424   1.45  3.0D-26  7.3D-13    5.33     1  158
   3 -2.6398794D+01 -4.76D-05  2.74D+02 -4.83D-02    422   1.44  2.8D-26  5.1D-13    5.33     1  158
   4 -2.6447106D+01 -5.30D-08  2.73D+02 -5.39D-05    422   1.44  2.8D-26  5.1D-13    5.33     1  158
   5 -2.6447160D+01 -7.95D-14  2.73D+02 -8.09D-11    422   1.44  2.8D-26  5.1D-13    5.33     1  158
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  2,J= 18)=   -26.4472   5 Iter  R(M)=  1.44  WF(NBEG=    50)/WF(M)= 2.8D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=  1780)/WF(M)= 5.1D-13
 Single well  ICOR= 0:  E(v=  2,J= 18)=    -26.45  v(SC)=   2.002  dGdv= 126.808
                                         (vD-v)=    2.1401   E(next)=  5.0337D+01

 Solve for  v=  3   J= 18   ETRIAL=  5.0336902D+01  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1  5.0336902D+01  6.91D-03  1.97D+02  9.74D+00    550   1.70 -1.5D-26  1.0D-01    2.58     1  156
   2  6.0080718D+01 -2.58D-03  5.09D+02 -1.41D+00    607   1.81 -2.8D-26  4.6D-01    2.24     1  156
   3  5.8672116D+01 -2.43D-04  3.96D+02 -1.70D-01    595   1.79 -2.3D-26  3.8D-01    2.29     1  156
   4  5.8501795D+01 -8.68D-06  3.87D+02 -6.23D-03    594   1.79 -2.3D-26  3.7D-01    2.30     1  156
   5  5.8495566D+01 -2.91D-07  3.87D+02 -2.09D-04    594   1.79 -2.3D-26  3.7D-01    2.30     1  156
   6  5.8495357D+01 -9.70D-09  3.87D+02 -6.96D-06    594   1.79 -2.3D-26  3.7D-01    2.30     1  156
   7  5.8495350D+01 -3.23D-10  3.87D+02 -2.32D-07    594   1.79 -2.3D-26  3.7D-01    2.30     1  156
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  3,J= 18)=    58.4954   7 Iter  R(M)=  1.79  WF(NBEG=    51)/WF(M)=-2.3D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=   849)/WF(M)= 3.7D-01
    Lifetime= 5.035D-12(s)   Width= 1.054D+00   dG/dv=  41.60   V(max)=    64.01
 Single well  ICOR= 0:  E(v=  3,J= 18)=     58.50  v(SC)=   2.983  dGdv=  44.289
                                         (vD-v)=    0.2492   E(next)=  1.3932D+01
          Find highest level of this potential is   E(v=  3)=  5.8495350262D+01
 ALF finds the highest calculated level is  E(v=  3)=  58.495350
```

```
 Solve for  v=  0   J= 18   ETRIAL= -4.5616720D+02  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -4.5616720D+02 -9.36D-11  1.70D+02 -1.53D-07    260   1.12  9.9D-27  3.5D-13    2.54     1  177
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  0,J= 18)=  -456.1672   1 Iter  R(M)=  1.12  WF(NBEG=    52)/WF(M)= 9.9D-27
                                     INNER= 0      WF(NEND=   799)/WF(M)= 3.5D-13

 Solve for  v=  1   J= 18   ETRIAL= -1.9581563D+02  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -1.9581563D+02 -1.33D-15  2.17D+02 -1.71D-12    331   1.26 -2.1D-26  4.5D-13    3.23     1  164
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  1,J= 18)=  -195.8156   1 Iter  R(M)=  1.26  WF(NBEG=    51)/WF(M)=-2.1D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=  1066)/WF(M)= 4.5D-13

 Solve for  v=  2   J= 18   ETRIAL= -2.6447160D+01  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1 -2.6447160D+01 -7.95D-14  2.73D+02 -8.09D-11    422   1.44  2.8D-26  7.2D-13    5.27     1  158
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  2,J= 18)=   -26.4472   1 Iter  R(M)=  1.44  WF(NBEG=    50)/WF(M)= 2.8D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=  1780)/WF(M)= 7.2D-13

 Solve for  v=  3   J= 18   ETRIAL=  5.8495350D+01  INNER= 0   WF(1st) WF(NEND)
 ITER    ETRIAL        F(E)      DF(E)     D(E)      M    R(M)   /WF(M)   /WF(M)   R(NEND) NBEG ITP1
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
   1  5.8495350D+01 -3.23D-10  3.87D+02 -2.32D-07    594   1.79 -2.3D-26  3.7D-01    2.30     1  156
 ---------------------------------------------------------------------------------------------------
E(v=  3,J= 18)=    58.4954   1 Iter  R(M)=  1.79  WF(NBEG=    51)/WF(M)=-2.3D-26
                                     INNER= 0      WF(NEND=   849)/WF(M)= 3.7D-01
    Lifetime= 5.035D-12(s)   Width= 1.054D+00   dG/dv=  41.60   V(max)=    64.01

 Find   4 Potential-1 vibrational levels with  J= 18
     v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)
    --------------    --------------    --------------    --------------
     0   -456.1672     1   -195.8156     2    -26.4472     3     58.4954
 ==============================================================================


Case 1.d:  Levels of a pointwise double-minimum potential for 3(PI)g Cl2
==============================================================================
 Generate   ZMU= 17.48442634000(u)   &   BZ= 1.037181808D+00((1/cm-1)(1/Ang**2))
          from atomic masses:  34.96885268000  &   34.96885268000(u)
 Integrate from  RMIN=  1.600  to  RMAX=  10.00  with mesh  RH= 0.001000(Angst)

 Potential #1 for Cl( 35)-Cl( 35)
 ================================
 State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=  95440.0000(cm-1)
 Perform cubic spline interpolation over the   29 input points
 To make input points Y(i) consistent with  Y(lim),  add  Y(shift)=      0.0000
```

```
Scale input points:  (distance)* 5.291772108D-01  &  (energy)* 8.065544400D+03
            to get required internal units  [Angstroms & cm-1 for potentials]
     r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)
  ----------------------   ----------------------   ----------------------
   3.340000  10.60800000    4.170000   8.59500000    5.370000   6.96200000
   3.400000   9.68300000    4.260000   8.70400000    5.510000   6.90800000
   3.430000   9.22100000    4.310000   8.75800000    5.660000   6.88000000
   3.490000   8.75800000    4.460000   8.43200000    5.800000   6.90800000
   3.570000   8.29500000    4.560000   8.13400000    5.940000   6.98900000
   3.660000   8.13200000    4.660000   7.88700000    6.000000   7.04400000
   3.760000   8.05100000    4.800000   7.61500000    6.200000   7.12500000
   3.860000   8.13200000    4.910000   7.42500000    6.400000   7.26100000
   3.940000   8.26800000    5.000000   7.34300000    6.600000   7.42500000
   4.030000   8.35000000    5.170000   7.12500000
-------------------------------------------------------------------------------
Extrapolate to   X .le. 1.7992  with
  Y= -5091495.587  +5.609801D+06 * exp(-4.542065D-02*X)
Extrapolate to  X .GE.  3.3867  using
  Y=  95440.0000 - [ 1.128770D+05/X**1 +1.377826D+05/X**3]
-------------------------------------------------------------------------------

Calculate properties of the single potential described above
Potential-1 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN

Eigenvalue convergence criterion is   EPS= 1.0D-06(cm-1)
Airy function at 3-rd turning point is quasibound outer boundary condition

State-1 electronic angular momentum  OMEGA= 0
        yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2

Solve for the  22 vibration-rotation levels of Potential-1:
  (v,J) =  ( 56,  0)  ( 57,  0)  ( 58,  0)  ( 59,  0)  ( 60,  0)  ( 61,  0)
           ( 62,  0)  ( 63,  0)  ( 64,  0)  ( 65,  0)  ( 66,  0)  ( 67,  0)
           ( 68,  0)  ( 69,  0)  ( 70,  0)  ( 72,  0)  ( 72,  0)  ( 73,  0)
           ( 74,  0)  ( 75,  0)  ( 76,  0)  ( 77,  0)

Matrix element arguments are powers of the distance  r (in Angstroms)
Coefficients of expansion for radial matrix element/expectation value argument:
      1.000000D+00 -2.000000D-01  3.000000D-02 -4.000000D-03
Find  2  potential minima:   Vmin=  64929.256  55490.947
              at mesh points   R =    1.99400    2.99500
Find  2  potential maxima:   Vmax=  70645.436  84013.345
              at mesh points   R =    2.28400   10.00000
E(v= 56, J=  0)=  68214.438   <M(r)>=  0.4721236994       <KE>=   4580.196
          <X** 1>=   3.63045127   <X** 2>=  13.66002892   <X** 3>=  52.89672853
-------------------------------------------------------------------------------
E(v= 57, J=  0)=  68387.998   <M(r)>=  0.4695211055       <KE>=   4617.063
          <X** 1>=   3.64732349   <X** 2>=  13.79516352   <X** 3>=  53.71727533
-------------------------------------------------------------------------------
E(v= 58, J=  0)=  68476.426   <M(r)>=  0.6824612177       <KE>=   1651.393
          <X** 1>=   2.04384519   <X** 2>=   4.18845602   <X** 3>=   8.60585634
-------------------------------------------------------------------------------
E(v= 59, J=  0)=  68559.695   <M(r)>=  0.4669189761       <KE>=   4652.829
```

```
          <X** 1>=   3.66408683   <X** 2>=  13.93033264   <X** 3>=  54.54340917
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 60, J=  0)=  68729.539   <M(r)>=  0.4643045290       <KE>=   4686.656
          <X** 1>=   3.68083020   <X** 2>=  14.06617696   <X** 3>=  55.37868492
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 61, J=  0)=  68897.547   <M(r)>=  0.4617011736       <KE>=   4718.810
          <X** 1>=   3.69738156   <X** 2>=  14.20154715   <X** 3>=  56.21723207
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 62, J=  0)=  69063.700   <M(r)>=  0.4591313914       <KE>=   4749.186
          <X** 1>=   3.71357576   <X** 2>=  14.33535705   <X** 3>=  57.05354180
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 63, J=  0)=  69214.948   <M(r)>=  0.6781183397       <KE>=   1985.878
          <X** 1>=   2.07712475   <X** 2>=   4.36259568   <X** 3>=   9.33364510
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 64, J=  0)=  69228.156   <M(r)>=  0.4588457942       <KE>=   4751.128
          <X** 1>=   3.71260668   <X** 2>=  14.36531493   <X** 3>=  57.39807961
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 65, J=  0)=  69390.488   <M(r)>=  0.4540380379       <KE>=   4803.188
          <X** 1>=   3.74528392   <X** 2>=  14.60094615   <X** 3>=  58.73339038
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 66, J=  0)=  69551.030   <M(r)>=  0.4516314964       <KE>=   4825.287
          <X** 1>=   3.75994565   <X** 2>=  14.72704336   <X** 3>=  59.54766857
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 67, J=  0)=  69709.530   <M(r)>=  0.4496202586       <KE>=   4837.877
          <X** 1>=   3.77158473   <X** 2>=  14.83463802   <X** 3>=  60.27548393
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 68, J=  0)=  69864.123   <M(r)>=  0.4631813287       <KE>=   4633.896
          <X** 1>=   3.66813651   <X** 2>=  14.22170337   <X** 3>=  57.46061741
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 69, J=  0)=  69900.180   <M(r)>=  0.6579325788       <KE>=   2352.457
          <X** 1>=   2.22764740   <X** 2>=   5.25807538   <X** 3>=  13.57005061
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 70, J=  0)=  70022.038   <M(r)>=  0.4464976859       <KE>=   4867.346
          <X** 1>=   3.78784876   <X** 2>=  15.00980661   <X** 3>=  61.55668989
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 72, J=  0)=  70321.487   <M(r)>=  0.4485338715       <KE>=   4776.940
          <X** 1>=   3.76631221   <X** 2>=  14.93793365   <X** 3>=  61.58542409
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 72, J=  0)=  70321.487   <M(r)>=  0.4485338715       <KE>=   4776.940
          <X** 1>=   3.76631221   <X** 2>=  14.93793365   <X** 3>=  61.58542409
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 73, J=  0)=  70453.823   <M(r)>=  0.5032628690       <KE>=   4057.676
          <X** 1>=   3.36247828   <X** 2>=  12.39895889   <X** 3>=  49.05256070
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 74, J=  0)=  70524.503   <M(r)>=  0.5646387149       <KE>=   3567.119
          <X** 1>=   2.91080360   <X** 2>=   9.57364570   <X** 3>=  35.10248406
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 75, J=  0)=  70634.089   <M(r)>=  0.4560303262       <KE>=   4812.997
          <X** 1>=   3.70350160   <X** 2>=  14.63177900   <X** 3>=  60.55568119
--------------------------------------------------------------------------------
E(v= 76, J=  0)=  70771.143   <M(r)>=  0.4453926382       <KE>=   4880.577
          <X** 1>=   3.77812257   <X** 2>=  15.13371060   <X** 3>=  63.24854142
--------------------------------------------------------------------------------
```

```
 E(v= 77, J=  0)=  70905.689   <M(r)>=  0.4521314033       <KE>=   4783.371
          <X** 1>=   3.72580681   <X** 2>=  14.82855323   <X** 3>=  61.89095769
 -------------------------------------------------------------------------------
 ===============================================================================
```

E. 示例 2a)–2e) 的输入文件

注意，输入数据文件每一行“%”号后面的内容是标注变量的注释，被程序忽略。

```
 47 109  1 2   0  1                                % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 2.a: X-state {109}AgD using EMO3(7,7) potential [JCP 123, 204304(2005)]'
 0.0010  0.8  30.0  1.d-6                          % RH RMIN RMAX EPS
 0  0  0    19250.d0   0.d0                        % NTP LPPOT OMEGA VLM
 3  3 3  0 7  1                                    % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
 19250.d0 1.6179162d0  0.d0                        % DSCM REQ Rref
  1.54358095D+00 3.73860D-02 1.66424D-01 9.8030D-02 1.7089D-01 6.0200D-02
  1.4000D-01 2.2400D-01
 107 1  3 3 -1 3  3 -1 2                           % MN1R MN2R PAD QAD NU1 NU2 QNA NT1 NT2
 0.0D+0 0.0D+0 1.175D+01 1.756D+01 -1.270D+01      % U2INF UA2(0) UA2(1) ...
 0.0D+0 0.0D+0 1.5D-04 9.3D-04                     % T2INF TA2(0) TA2(1) ...
-55  1  2  -1  0 1  -1 0                           % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 0                                              % IV(1) IJ(1)

 12 24  1 2  0  1                      % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 2.b: Properties of MgD from final recommended 2013 potential for MgH'
 0.0005d0  0.50 99.d0  1.d-05          % RH RMIN RMAX EPS
 0  0  0  0.0d0                        % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 4  5 4  -1 12  1                      % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
 11104.25d0  1.7296854D0  2.74d0       % DSCM REQ Rref
 3 0.81 -2  1                          % NCMM rhoAB IVSR IDSTT
 6 2.77550D+05
 8 3.45490D+06
10 4.61400D+07                         % MMLR CMM
  1.170475460D+00 1.08015790D+00 2.67329710D+00  2.483590D+00
  7.401300000D-01 1.91470000D-01 6.03830000D-01 -2.48730D+00
 -7.665300000D+00 -5.7310000D+00 2.83900000D+00  6.05400D+00
  2.400000000D+00                     % PARM(i=0,13)
 24 1  6 4  3 13  4 -1 7              % MN1R MN2R PAD QAD NU1 NU2 QNA NT1 NT2
  0.d0  1.310D+00 4.180D+00 2.670D+00 4.0D+00  % U1inf, U1i(i)
  0.d+00 -1.5183D+01 3.7524D+01 -1.1607D+01 3.2200D+01 6.0570D+01 2.2950D+02
 -1.5610D+03 -2.0130D+03 1.2530D+04 5.3600D+03 -4.9740D+04 1.0500D+04
  7.110D+04 -4.70D+04                 % U2inf, U2i(i)
  0.d0 0.000D+00 7.266D-04 2.700D-04 9.110D-04 2.970D-03 -1.900D-03
 -7.200D-03 2.300D-02                 %  T2inf, T2i(i)
-99  1  1  -1 0 1  1  0   0          % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 0                                 % IV(1) IJ(1)

 3 7  3 7  0   1                                  % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 2.c: Huang/Le Roy DELR(8) for Li2(B) [JCP 119, 7398 (2003)]'
 0.005 1.5  60.    1.d-8                         % RH RMIN RMAX EPS
-1  0 1 0.d0                                     % NTP LPPOT IOMEG VLIM
```

```
 5 3  3  -1  8  1                                  % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
 2986.600d0 2.935961d0  3.6d0                      % DSCM REQ Rref
 4 0.54d0  -0  1                                   % NCMM rhoAB IVSR IDSTT
 3 -1.788d5  6 6.97586d6  8 1.378d8  10 3.445d9    % MMCM(j) CMM(j)
 1.0585149D+00 3.70878D-01 2.77660D-01 1.1109D-01 -1.3076D-01 -2.805D-01
-8.69D-02      3.29D-01    1.61D-01
  7 7  3  3  2  2  3  -1 -1                        % MN1R MN2R PAD QAD NU1 NU2 QNA NT1 NT2
  1.05578d0  2.52D-01 -3.29D+00 1.40D+00           % U1INF  U1(0) U1(1)
  1.05578d0  2.52D-01 -3.29D+00 1.40D+00           % U2INF  U2(0) U2(1)
 -99 1  2   0   0  1  -1  0                        % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0  0                                             % IV(i) IJ(i)

 10 20  36 84  0   1                               % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 2.d: Aziz HFD-B(6,8,10,12) for {20}Ne{84}Kr [JCP 91, 6348 (1989)]'
 0.010  2.0  99.   1.d-08                          % RH RMIN RMAX EPS
 -1 00  0     0.d0  49.75d0                        % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 6 0 0  0  0 0                                     % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
 49.75d0  3.621d0  0.d0                            % DSCM REQ Rref
 4  0.d0  -2  1                                    % NCMM rhoAB IVSR IDSTT
  6 1.16162375d0   8 0.39191564d0
 10 0.35284381d0  12 0.29724436d0                  % MMLR(i) CMM(i) for i=1,2
 1.d0  0.9365d0  2.d0  0.71720676d0  0.d0          % alpha_i (i=1-3) beta2 gamma
 -99 1 2  0  0 1  -1  0                           % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRW
 0  0                                              % IV(i) IJ(i)

 20 40  20 40  0   1                               % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 2.e: "Tiemann-type" potential for Ca2(X) [Phys.Rev. A66, 042503(2002)'
 0.0005  3.0  80.   1.d-08                         % RH RMIN RMAX EPS
 -1  0  0  1102.096077d0                           % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 8 1 1  -1 20   0                                  % IPOTL PPAR QPAR APSE Nbeta IBOB
 1102.096077d0 4.277277d0   0.d0                   % DSCM REQ  Rref
  2  0.d0  -2  1                                  % NCMM rhoAB IVSR IDSTT
  6 -1.074d7  8 -2.4505d8                          % MMLR(j) CMM(j) j=1,NCMM
  0.00042747d0
 -0.25408309276477307 7d01  0.37961100260114922 1d04  0.38207030202249524 1d03
 -0.27439039695467931 8d04 -0.32273633419080092 6d04  0.36311380569301854 8d03
  0.63437054218975527 0d04 -0.74015183596084689 3d04 -0.19073891300372906 7d05
  0.54234739243301759 4d05  0.44039230437301106 6d05 -0.15538794495452611 6d06
 -0.83662838135323618 2d05  0.21383106708315687 1d06  0.15592244922282683 5d06
 -0.15626087299948313 7d06 -0.14671112095921966 8d06  0.27754299977223086 9d05
  0.71290801557933911 7d05 -0.12611555040899897 9d04
 -0.5929d0      3.66d0  10.d0                      %  b  R{inn}  R{out}
 -99 1  2  0  0 1  -1  0                           % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0  0                                             % IV(i) IJ(i)
```

F. 示例 3 的输入文件

注意，输入数据文件每一行“%”号后面的内容是标注变量的注释，被程序忽略。

```
 35 79  35 79  0   2                               % IAN1 IMN1 IAN2 IMN2 CHARGE NUMPOT
'Case 3:  Predict emission for B-X Br2 based on Gerstenkorn (1987) constants'
```

```
 0.0015 1.85  15.0   1.d-4                        % RH RMIN RMAX EPS
 123  0  0  19742.072d0                           % NTP LPPOT IOMEG VLIM
 10 0  4  5 1.8D+05                               % NUSE IR2 ILR NCN CNN
 1.D0 1.D0  15902.4802d0                          % RFACT EFACT VSHIFT & B-state turning points
   2.32483352887883   3834.348717   2.32492725139916   3831.646866
   2.32505070817846   3828.090070   2.32520875281731   3823.540508
   2.32540641247184   3817.856430   2.32564885907544   3810.893306
  ..............................................................
  .......... skip 56 lines listing 112 more turning points ........
  ..............................................................
   6.87678817820732   3817.856430   7.25492791418183   3823.540508
   7.69918940093639   3828.090070   8.22965127226713   3831.646866
   8.87579778305112   3834.348717

 47  0  0  16056.926D0                            % NTP2 LPPOT2 IOMEG2 VLIM2
 10 0  0  6 0.D0                                  % NUSE2 IR22 ILR2 NCN2 CNN2
 1.D0 1.D0  0.d0                                  % RFACT EFACT VSHIFT2
   2.05649830399176   4483.356304   2.06283295581950   4189.629584
   2.06951602200031   3893.539190   2.07659093472317   3595.104297
   2.08411094486653   3294.343327   2.09214251282019   2991.273984
  ..............................................................
  .......... skip 18 lines listing 36 more turning points .........
  ..............................................................
   2.56851940726203   3294.343327   2.58514008764203   3595.104297
   2.60140908192717   3893.539190   2.61738272682198   4189.629584
   2.63310768612594   4483.356304

-40  1  0  -4  999 1  -1 0                        % NLEV1 AUTO1 LCDC LXPCT NJM JDJR IWR LPRWF
  0 0                                             % IV(1) IJ(1)
 1  0   1.D0                                      % MORDR IRFN RREF
-0.219 0.265                                      % DM(0) DM(1)
 15  1  -1 +1 2                                   % NLEV2 AUTO2 J2DL J2DU J2DD
 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14               % {IV2(i)}
```

G. 示例 3 的通道 6 输出文件

```
Case 3:  Predict emission for B-X Br2 based on Gerstenkorn (1987) constants
================================================================================
 Generate   ZMU= 39.45916880000(u)   &   BZ= 2.340730616D+00((1/cm-1)(1/Ang**2))
          from atomic masses:  78.91833760000  &   78.91833760000(u)
 Integrate from  RMIN=  1.850  to  RMAX=  15.00  with mesh  RH= 0.001500(Angst)

 Potential #1 for Br( 79)-Br( 79)
 ================================
 State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=  19742.0720(cm-1)
 Perform 10-point piecewise polynomial interpolation over  123 input points
 Beyond read-in points extrapolate to limiting asymptotic behaviour:
                    Y(r)  =  Y(lim) - (   0.1800000D+06)/r** 5
 To make input points Y(i) consistent with  Y(lim),  add  Y(shift)=  15902.4802
 Scale input points:  (distance)* 1.000000000D+00  &  (energy)* 1.000000000D+00
```

```
            to get required internal units  [Angstroms & cm-1 for potentials]
     r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)
  ----------------------   ----------------------   ----------------------
  2.32483353   3834.3487   2.42191370   1696.7527   3.22507343   1821.0440
  2.32492725   3831.6469   2.43001839   1568.5519   3.26089292   1941.3789
.......................................................................
....................... skip 37 lines of this listing ...................
.......................................................................
  2.40751394   1941.3789   3.15509529   1568.5519   8.22965127   3831.6469
  2.41443578   1821.0440   3.18985642   1696.7527   8.87579778   3834.3487
-------------------------------------------------------------------------
Extrapolate to   X .le. 2.3249  with
  Y=    14763.263  +3.552602D+09 * exp(-5.797858D+00*X)
Function for  X .GE.  8.230  generated by  4-point inverse-power interpolation
  with leading term  1/r**5  relative to dissociation limit   YLIM=  19742.072
  and (dimensionless) leading coefficient fixed as   C5=  180000.00
-------------------------------------------------------------------------

Get matrix elements between levels of Potential-1 (above) & Potential-2 (below)
--------------------------------------------------------------------------
For Potential #2:
=================
State has  OMEGA= 0   and energy asymptote:   Y(lim)=  16056.9260(cm-1)
Perform 10-point piecewise polynomial interpolation over   47 input points
To make input points Y(i) consistent with  Y(lim),  add  Y(shift)=      0.0000
Scale input points:  (distance)* 1.000000000D+00  &  (energy)* 1.000000000D+00
            to get required internal units  [Angstroms & cm-1 for potentials]
     r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)        r(i)         Y(i)
  ----------------------   ----------------------   ----------------------
  2.05649830   4483.3563   2.18626063    646.2909   2.42013527    966.1727
  2.06283296   4189.6296   2.19810575    485.5309   2.43259119   1125.2912
  2.06951602   3893.5392   2.21248391    324.2269   2.44438269   1283.8592
  2.07659093   3595.1043   2.22316187    227.1840   2.45563605   1441.8751
  2.08411094   3294.3433   2.23177061    162.3804   2.46644318   1599.3372
  2.09214251   2991.2740   2.24253421     97.4903   2.47687343   1756.2436
  2.10077036   2685.9133   2.25851483     32.5137   2.49680783   2068.3827
  2.11010533   2378.2776   2.28102606      0.0000   2.51575473   2378.2776
  2.12029713   2068.3827   2.30436129     32.5137   2.53392724   2685.9133
  2.13155647   1756.2436   2.32199230     97.4903   2.55147764   2991.2740
  2.13767849   1599.3372   2.33440900    162.3804   2.56851941   3294.3433
  2.14419655   1441.8751   2.34467357    227.1840   2.58514009   3595.1043
  2.15117974   1283.8592   2.35784040    324.2269   2.60140908   3893.5392
  2.15871971   1125.2912   2.37638051    485.5309   2.61738273   4189.6296
  2.16694249    966.1727   2.39240504    646.2909   2.63310769   4483.3563
  2.17602973    806.5054   2.40683303    806.5054
-------------------------------------------------------------------------
Extrapolate to   X .le. 2.0628  with
  Y=    -2292.367  +1.200354D+10 * exp(-6.996051D+00*X)
Function for  X .GE.  2.6174   generated as
  Y=  16056.9260 - ( 1.657906D+06) * r** 22.046446  * exp{-(   9.991684*r)}
-------------------------------------------------------------------------
Potential-1 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN
```

```
Eigenvalue convergence criterion is   EPS= 1.0D-04(cm-1)
Airy function at 3-rd turning point is quasibound outer boundary condition

State-1 electronic angular momentum  OMEGA= 0
        yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2
For  J=  0, find the first  41 levels of Potential-1   with   VLIM=  19742.072

  and automatically increment  J  in steps of  1 to a maximum value of 999

Matrix element arguments are powers of the distance  r (in Angstroms)
Coefficients of expansion for radial matrix element/expectation value argument:
     -2.190000D-01  2.650000D-01
Potential-2 uses inner boundary condition of  zero value  at  RMIN

Using the rotational selection rule:  delta(J)= -1 to 1 with increment 2
  calculate matrix elements for coupling to the  15 vibrational levels of
  Potential-2:   v =   0   1   2   3   4   5   6   7   8   9  10  11  12  13
                      14

State-2 electronic angular momentum  OMEGA= 0
        yields centrifugal potential  [J*(J+1) - 0.00]/r**2
-------------------------------------------------------------------------------
.......................................................................
................... skip 2727 lines summarizing results for v=0-33 ........
.......................................................................
+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
*** For  J=100  E= 19743.24  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=100  E= 19743.22  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=100  E= 19743.22  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)=  99.17  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J=101  E= 19748.69  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=101  E= 19748.67  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=101  E= 19748.67  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)= 100.17  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J=102  E= 19754.16  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=102  E= 19754.15  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=102  E= 19754.15  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)= 101.18  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J=103  E= 19759.66  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=103  E= 19759.65  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J=103  E= 19759.65  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)= 102.19  for  R > R(max)=  15.00
For J=127  ETRY= 19891.7867 > VMAX= 19891.7746  find onee turn point:  R=  2.37
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=10  cut  DE= -3.51D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=20  cut  DE= -3.39D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=26  cut  DE= -3.39D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=28  cut  DE= -3.39D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=29  cut  DE=  1.70D-03  in HALF
*** CAUTION for  v= 34  J=127  SCHRQ doesn't converge by  ITER=30  DE= 1.01D-03
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT= 7  cut  DE=  1.80D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=28  cut  DE=  1.70D-03  in HALF
*** SCHRQ has a convergence problem, so for  IT=30  cut  DE= -3.52D-03  in HALF
*** CAUTION for  v= -1  J=127  SCHRQ doesn't converge by  ITER=30  DE=-1.76D-03
```

```
For vibrational level  v = 34   of Potential-1
  J      E         J      E         J      E         J      E         J      E
--------------  --------------  --------------  --------------  --------------
  0  19443.803   26  19466.021   52  19529.969   78  19632.179  104  19765.173
  1  19443.867   27  19467.723   53  19533.224   79  19636.793  105  19770.719
  2  19443.994   28  19469.486   54  19536.537   80  19641.452  106  19776.284
  3  19444.185   29  19471.312   55  19539.905   81  19646.158  107  19781.868
  4  19444.439   30  19473.198   56  19543.330   82  19650.908  108  19787.469
  5  19444.756   31  19475.147   57  19546.811   83  19655.702  109  19793.083
  6  19445.138   32  19477.157   58  19550.347   84  19660.539  110  19798.709
  7  19445.582   33  19479.228   59  19553.939   85  19665.420  111  19804.345
  8  19446.090   34  19481.360   60  19557.585   86  19670.343  112  19809.988
  9  19446.662   35  19483.553   61  19561.286   87  19675.307  113  19815.634
 10  19447.297   36  19485.806   62  19565.042   88  19680.311  114  19821.282
 11  19447.995   37  19488.120   63  19568.851   89  19685.356  115  19826.927
 12  19448.756   38  19490.495   64  19572.714   90  19690.440  116  19832.565
 13  19449.581   39  19492.930   65  19576.629   91  19695.561  117  19838.191
 14  19450.468   40  19495.425   66  19580.598   92  19700.721  118  19843.802
 15  19451.419   41  19497.979   67  19584.619   93  19705.916  119  19849.390
 16  19452.433   42  19500.594   68  19588.692   94  19711.148  120  19854.948
 17  19453.510   43  19503.267   69  19592.816   95  19716.413  121  19860.467
 18  19454.650   44  19506.000   70  19596.992   96  19721.713  122  19865.936
 19  19455.852   45  19508.792   71  19601.218   97  19727.044  123  19871.337
 20  19457.117   46  19511.643   72  19605.494   98  19732.407  124  19876.643
 21  19458.445   47  19514.552   73  19609.820   99  19737.800  125  19881.820
 22  19459.836   48  19517.520   74  19614.196  100  19743.222  126  19886.844
 23  19461.289   49  19520.546   75  19618.620  101  19748.672
 24  19462.804   50  19523.629   76  19623.092  102  19754.148
 25  19464.381   51  19526.770   77  19627.612  103  19759.649
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
.......................................................................
................... skip 230 lines summarizing results for v= 35-39 .........
.......................................................................
*** For  J= 74  E= 19742.97  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 74  E= 19742.96  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 74  E= 19742.96  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)=  72.87  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J= 75  E= 19746.03  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 75  E= 19746.02  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 75  E= 19746.02  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)=  73.89  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J= 76  E= 19749.10  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 76  E= 19749.09  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 76  E= 19749.09  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)=  74.90  for  R > R(max)=  15.00
*** For  J= 77  E= 19752.19  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 77  E= 19752.18  R(3-rd) > RMAX  & E < V(N)  so try WKB B.C. @ RMAX
*** For  J= 77  E= 19752.18  R(3-rd) beyond range so tunneling calculation uses
       pure centrifugal potential with  J(app)=  75.92  for  R > R(max)=  15.00
For J= 93  ETRY= 19800.6818 > VMAX= 19800.4705  find onee turn point:  R=  2.35
For J= 93  ETRY= 19800.6892 > VMAX= 19800.4705  find onee turn point:  R=  2.35
For J= 93  ETRY= 19800.6892 > VMAX= 19800.4705  find onee turn point:  R=  2.35
```

```
 For J= 93  ETRY= 19800.6892 > VMAX= 19800.4705  find onee turn point:  R=  2.35

 For vibrational level  v = 40   of Potential-1
   J      E         J      E         J      E         J      E         J      E
 --------------  --------------  --------------  --------------  --------------
   0  19616.873   19  19626.163   38  19652.625   57  19694.708   76  19749.092
   1  19616.922   20  19627.136   39  19654.470   58  19697.304   77  19752.181
   2  19617.020   21  19628.157   40  19656.358   59  19699.935   78  19755.283
   3  19617.168   22  19629.225   41  19658.289   60  19702.600   79  19758.395
   4  19617.364   23  19630.341   42  19660.263   61  19705.297   80  19761.516
   5  19617.609   24  19631.503   43  19662.279   62  19708.027   81  19764.642
   6  19617.904   25  19632.713   44  19664.337   63  19710.788   82  19767.771
   7  19618.247   26  19633.970   45  19666.437   64  19713.579   83  19770.899
   8  19618.639   27  19635.273   46  19668.577   65  19716.401   84  19774.022
   9  19619.081   28  19636.623   47  19670.759   66  19719.250   85  19777.138
  10  19619.571   29  19638.019   48  19672.980   67  19722.128   86  19780.239
  11  19620.109   30  19639.461   49  19675.242   68  19725.033   87  19783.320
  12  19620.697   31  19640.949   50  19677.543   69  19727.963   88  19786.373
  13  19621.333   32  19642.482   51  19679.882   70  19730.918   89  19789.385
  14  19622.017   33  19644.061   52  19682.260   71  19733.896   90  19792.337
  15  19622.750   34  19645.685   53  19684.676   72  19736.896   91  19795.203
  16  19623.531   35  19647.353   54  19687.130   73  19739.918   92  19797.968
  17  19624.360   36  19649.066   55  19689.620   74  19742.958
  18  19625.238   37  19650.824   56  19692.146   75  19746.017
++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++

 Find  41 Potential-1 vibrational levels with  J=  0
     v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)        v     E(v)
    --------------    --------------    --------------    --------------
     0  15985.8099    11  17599.2328    22  18743.5515    33  19404.8742
     1  16150.1163    12  17723.5255    23  18822.9413    34  19443.8033
     2  16311.0672    13  17843.8623    24  18898.2750    35  19479.6566
     3  16468.6043    14  17960.1998    25  18969.6004    36  19512.5503
     4  16622.6712    15  18072.4992    26  19036.9760    37  19542.6009
     5  16773.2113    16  18180.7266    27  19100.4706    38  19569.9259
     6  16920.1678    17  18284.8542    28  19160.1627    39  19594.6434
     7  17063.4841    18  18384.8610    29  19216.1394    40  19616.8729
     8  17203.1035    19  18480.7338    30  19268.4954
     9  17338.9707    20  18572.4682    31  19317.3318
    10  17471.0312    21  18660.0691    32  19362.7547

 An  n= 5  N-D theory extrapolation from last 2 levels implies   vD =  59.899
 ==============================================================================
```

H. 示例 3 的通道 8 输出文件

```
Case 3:  Predict emission for B-X Br2 based on Gerstenkorn (1987) constants
==============================================================
 Note that (v',J') & (v",J") strictly label the upper and lower levels, resp.,
      and  E(lower)=E"
```

```
but  E(2)-E(1)  is:  (energy of State-2 level) - (energy of State-1 level)

           Band
dJ(J")    v'   v"  E(lower)  E(2)-E(1)  A(Einstein)   F-C Factor  <v'j'|M|v"j">
------   -------  --------   --------   -----------   -----------   -----------
P(  1)    0 -  0    162.54  -15823.27   7.51655D-05   3.26301D-10   7.77793D-06
P(  1)    0 -  1    485.69  -15500.12   1.98479D-03   9.03473D-09   4.12243D-05
P(  1)    0 -  2    806.67  -15179.14   2.56291D-02   1.22429D-07   1.52860D-04
P(  1)    0 -  3   1125.45  -14860.36   2.15688D-01   1.08216D-06   4.57792D-04
P(  1)    0 -  4   1442.03  -14543.78   1.33030D+00   7.01609D-06   1.17424D-03
P(  1)    0 -  5   1756.40  -14229.41   6.41089D+00   3.55737D-05   2.66365D-03
P(  1)    0 -  6   2068.54  -13917.27   2.51332D+01   1.46864D-04   5.45245D-03
P(  1)    0 -  7   2378.43  -13607.38   8.24026D+01   5.07537D-04   1.02119D-02
P(  1)    0 -  8   2686.06  -13299.75   2.30523D+02   1.49801D-03   1.76763D-02
P(  1)    0 -  9   2991.42  -12994.39   5.58669D+02   3.83406D-03   2.84933D-02
P(  1)    0 - 10   3294.49  -12691.32   1.18684D+03   8.61075D-03   4.30264D-02
P(  1)    0 - 11   3595.25  -12390.56   2.23108D+03   1.71302D-02   6.11533D-02
P(  1)    0 - 12   3893.69  -12092.12   3.73965D+03   3.04191D-02   8.21222D-02
P(  1)    0 - 13   4189.78  -11796.03   5.62413D+03   4.85201D-02   1.04526D-01
.............................................................................
................... Remove 267521 lines ....................................
.............................................................................
R( 91)   40 -  5   2427.17  -17370.80   4.55940D+01   3.22713D-04  -7.46819D-03
P( 93)   40 -  5   2456.75  -17341.21   4.45961D+01   3.13842D-04  -7.36500D-03
R( 91)   40 -  6   2736.53  -17061.44   1.63941D+01   1.20264D-04   4.60057D-03
P( 93)   40 -  6   2765.99  -17031.98   1.74563D+01   1.27340D-04   4.73392D-03
R( 91)   40 -  7   3043.63  -16754.34   8.11570D+01   6.22525D-04   1.05187D-02
P( 93)   40 -  7   3072.96  -16725.00   8.14359D+01   6.21159D-04   1.05076D-02
R( 91)   40 -  8   3348.45  -16449.52   6.05804D+00   4.87388D-05   2.95411D-03
P( 93)   40 -  8   3377.66  -16420.31   5.45704D+00   4.36756D-05   2.79608D-03
R( 91)   40 -  9   3650.98  -16146.99   4.46439D+01   3.71936D-04  -8.24583D-03
P( 93)   40 -  9   3680.06  -16117.91   4.60071D+01   3.81203D-04  -8.34820D-03
R( 91)   40 - 10   3951.19  -15846.78   4.35551D+01   3.79843D-04  -8.37720D-03
P( 93)   40 - 10   3980.15  -15817.82   4.27258D+01   3.70610D-04  -8.27501D-03
R( 91)   40 - 11   4249.08  -15548.89   4.25958D+00   3.84497D-05   2.69541D-03
P( 93)   40 - 11   4277.91  -15520.06   4.87948D+00   4.38321D-05   2.87733D-03
R( 91)   40 - 12   4544.62  -15253.35   5.56357D+01   5.28869D-04   1.00258D-02
P( 93)   40 - 12   4573.32  -15224.64   5.60365D+01   5.29892D-04   1.00359D-02
R( 91)   40 - 13   4837.80  -14960.17   6.82655D+00   6.82839D-05   3.61565D-03
P( 93)   40 - 13   4866.37  -14931.60   6.15591D+00   6.12800D-05   3.42476D-03
R( 91)   40 - 14   5128.60  -14669.37   2.97279D+01   3.08674D-04  -7.77062D-03
P( 93)   40 - 14   5157.04  -14640.93   3.09159D+01   3.19393D-04  -7.90463D-03
===============================================================================
```