

补充材料

CaSH 分子的高精度电子结构计算及其用于激光制冷 目标分子的理论分析

冯卓¹⁾ 索兵兵^{1)†} 韩慧仙²⁾ 李安阳³⁾

1) (西北大学现代物理研究所, 陕西省理论物理前沿重点实验室, 西安 710127)

2) (西北大学物理学院, 西安 710127)

3) (西北大学化学与材料科学学院, 西安 710127)

表 S1: 采用不同基组计算所的 CaSH 的基态和激发态平衡结构参数

Table S1: Equilibrium structures of the ground state and excited states of CaSH calculated on different level of basis sets

Basis set level	State	$r_0(\text{Ca-S})(\text{Å})$	$r_0(\text{S-H})(\text{Å})$	$\theta(\text{Ca-S-H})(^\circ)$
3 ζ	\tilde{X}^2A'	2.592	1.341	91.0
	\tilde{A}^2A'	2.564	1.343	87.9
	\tilde{B}^2A''	2.570	1.341	91.0
	\tilde{C}^2A'	2.538	1.357	83.8
4 ζ	\tilde{X}^2A'	2.572	1.339	91.0
	\tilde{A}^2A'	2.541	1.343	86.0
	\tilde{B}^2A''	2.555	1.339	91.0
	\tilde{C}^2A'	2.532	1.346	86.0
Basis set limit	\tilde{X}^2A'	2.557	1.338	91.0
	\tilde{A}^2A'	2.528	1.343	86.0
	\tilde{B}^2A''	2.554	1.338	91.0
	\tilde{C}^2A'	2.525	1.345	86.0