

含Hg化合物的相对论赝势从头计算研究—— HgX_2 ($X=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 的电子结构

马忠新; 戴树珊

云南大学化学系, 昆明

摘要:

本文应用相对论赝势从头计算方法, 在不同基组水平上, 系统地研究了卤化汞(HgX_2 , $X=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 系列的电子结构。表明除Hg的6s主要参与成键外, 5dz²也起了重要的作用。并且随卤素原子序的增加, n成键作用也增强。同时还应用单电子自旋-轨道耦合方法, 研究了旋-轨耦合效应的影响, 指定了该系列化合物的光电子能谱。

关键词:

收稿日期 1988-03-08 修回日期 1988-09-19 网络版发布日期 1989-10-15

通讯作者: 戴树珊 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(2149KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

[本文关键词相关文章](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [马忠新](#)

▶ [戴树珊](#)