

## F22分子6a',4a''和3a''轨道的电子动量谱研究

张虚怀, 陈向军, 贾昌春, 徐春凯, 尹晓峰, 单旭, 魏征, 徐克尊

中国科技大学选键化学重点实验室; 近代物理系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

### 摘要

在 1 2 0 0eV入射能量下测量了F2 2分子轨道 6a',4a''和 3a''的电子动量谱,并与用Hartree Fock和密度泛函方法选取不同基组的理论计算结果进行了比较.

At impact energy of 1 200 eV plus binding energy and symmetric non-coplanar geometry, the electron momentum spectra of chlorodifluoromethane's outer valence orbitals of 6a', 4a'' and 3a'' have been measured by binary (e, 2e) electron momentum spectroscopy. The experimental momentum profiles for the different orbitals are compared with Hartree-Fock (HF) and density functional theory (DFT) calculations using different-sized basis sets.

关键词 [电子动量谱](#) [氟利昂](#) [分子轨道](#) [密度泛函](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 张虚怀; 陈向军; 贾昌春; 徐春凯; 尹晓峰; 单旭; 魏征; 徐克尊

### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(663KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“电子动量谱”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张虚怀](#)

· [陈向军](#)

· [贾昌春](#)

· [徐春凯](#)

· [尹晓峰](#)

· [单旭](#)

· [魏征](#)

· [徐克尊](#)