

## 研究论文

### 半正交化基近似计算的改进

丁涪江; 张良辅; 李广年

中国科学院成都有机化学研究所, 成都 610015

#### 摘要:

Kashiwagi建议, 在量子化学从头计算中采用半正交化基组, 在电子排斥积分中忽略某些正交轨道间的重迭, 同时保留核吸引积分中的类似重迭。本文建议在核吸引积分中也忽略这些微分重迭。这一改进提高了计算的精度。对仍然保留的微分重迭, 在计算三、四中心积分时建议在保持电荷守恒的条件下, 用较简单的轨道对之间的微分重迭代替, 大大节约了计算机时。

关键词: 近似从头算 半正交化 积分近似 电荷守恒

收稿日期 1990-12-10 修回日期 1991-04-18 网络版发布日期 1992-06-15

通讯作者: 丁涪江 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\(962KB\)](#)

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

▶ [近似从头算](#)

▶ [半正交化](#)

▶ [积分近似](#)

▶ [电荷守恒](#)

本文作者相关文章

▶ [丁涪江](#)

▶ [张良辅](#)

▶ [李广年](#)