

最弱受约束电子势模型理论下使用双广义拉盖尔多项式计算氦原子基态能量

郑能武, 张天忆

中国科学技术大学化学系, 合肥 230026

摘要:

计算了在最弱受约束电子势模型理论下使用双广义拉盖尔多项式的氦原子基态能量. 给出了氦原子基态能量期望值的表达式. 通过搜索它的极小, 找到了氦原子基态能量的极小值. 将我们的结果与双灼(zeta)函数的Hartree-Fock (HF)方法的结果进行比较后发现, 我们的结果略优于双灼(zeta)函数的Hartree-Fock(HF)方法的结果. 如此表明线性组合技术可以应用在最弱受约束电子势模型理论中.

关键词: 最弱受约束电子势模型理论 氦原子基态能量 线性组合

收稿日期 2009-01-09 修回日期 2009-03-12 网络版发布日期 2009-04-06

通讯作者: 郑能武 Email: nwzheng@ustc.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(121KB\)](#)

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

▶ 最弱受约束电子势模型理论

▶ 氦原子基态能量

▶ 线性组合

本文作者相关文章

▶ 郑能武

▶ 张天忆