

引用信息: Jin Bei-Yan; Liu Cheng-Bu; Hu Hai-Quan; Sun Jia-Zhong. Acta Phys. -Chim. Sin., 1990, 6(04): 456-464 [金北雁;刘成卜;胡海泉;孙家钟. 物理化学学报, 1990, 6(04): 456-464]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 研究论文

### 两类双粒子函数建造的 $n$ 电子波函数的扩展及其应用

金北雁; 刘成卜; 胡海泉; 孙家钟

吉林大学理论化学研究所

摘要:

讨论了具有辛群对称性的一类 $n$ 电子波函数 $\Psi_{\pm}(n, s_1, s_2) = N Q_{\pm}^{-s_1}(\xi)$  multiply from  $t=1$  to  $2$   $a_{\pm t} \sim +_{\pm}(a_{\pm t}) G_{\pm}(\xi, r, v_{\pm}(r+1)|0\rangle$ 的性质. 这类函数是两类双粒子函数建造的 $n$ 电子波函数的扩展. 它们既适用于闭壳层, 也适用于开壳层体系. 用此类函数计算了 $Li_2$ 、 $LiH_2$ 、 $CH_3$ 、 $OH$ 等体系. 结果表明, 这类函数能较好地描述电子和关作用。

关键词:

收稿日期 1989-08-04 修回日期 1989-11-30 网络版发布日期 1990-08-15

通讯作者: 刘成卜 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\(6088KB\)](#)

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](#)

[▶ 金北雁](#)

[▶ 刘成卜](#)

[▶ 胡海泉](#)

[▶ 孙家钟](#)