

## 准分子CdNe的相对论赝势SCF/SDCI计算

Calculation of relativistic pseudopotential SCF/SDCI for quasi molecule CdNe

摘要点击 12 全文点击 9 投稿时间: 1999-4-20

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

DOI编号 1000-0364(2000)17-93-3

中文关键词 [SCF/SDCI](#) [CdNe](#)

英文关键词

基金项目 云南省自然科学基金!资助 ( 98B0 0 1M )

作者

单位

E-mail

[涂学炎](#)

[云南大学化学系; 昆明理工大学基](#)

[李西平](#)

中文摘要

用相对论赝势从头算自洽场/单双重电子激发电子相关方法(SCF/SDCI)对准分子CdNe的基态( $X1\Sigma^+$ )和几个低激发态( $A3\Pi$ 、 $B3\Sigma^+$ 、 $C1\Pi$ 和 $D1\Sigma^+$ )进行了计算,得到了这些态的电子结构、势能曲线及光谱常数,并进行了讨论

英文摘要

The relativistic pseudopotential ab initio SCF and the electronic interrelation of the single and double electron excitation calculation have been carried out for Quasi-molecule CdNe. The electronic structure, the potential energy curves and the spectra constants of the ground( $X1\Sigma^+$ ) and a few lowlying excited states ( $A3\Pi$ ,  $B3\Sigma^+$ ,  $C1\Pi$  and  $D1\Sigma^+$ ) have been obtained and discussed.

您是第 110835 位访客

版权所有 © 2006 《原子与分子物理学报》编辑部

通讯地址: 四川省成都市武侯区四川大学收发服务中心378号信箱 邮编: 610065

电话: (028)85405516 传真: (028)85405516 E-mail: [zyf@chinajournal.net.cn](mailto:zyf@chinajournal.net.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计