

引用信息: Wang Jun; Guo Ying-Chun; Yang Xiao-Hua; Wu Sheng-Hai; Liu Yu-Yan; Chen Yang-Qin. Acta Phys. -Chim. Sin., 2004, 20(08): 877-881 [王珺; 郭迎春; 杨晓华; 吴升海; 刘煜炎; 陈扬骥. 物理化学学报, 2004, 20(08): 877-881]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## CASSCF方法对H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>激发态势能面的研究

王珺; 郭迎春; 杨晓华; 吴升海; 刘煜炎; 陈扬骥

华东师范大学物理系, 光谱学和波谱学教育部重点实验室, 上海 200062

摘要:

采用Gaussian 98程序中的CASSCF(完全活性空间自洽场)计算了H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>激发态的势能面, 并对计算结果进行拟合, 得到了势能曲面的解析表达式. 作者对活性空间和基组的选取做了分析, 并将得到的势能面与广泛使用的MRD-CI结果进行了比较, 结果基本一致.

关键词: 量化计算 完全活性空间(CAS) 分子轨道 势能面 Gaussian 98程序

收稿日期 2004-01-06 修回日期 2004-03-16 网络版发布日期 2004-08-15

通讯作者: 郭迎春 Email: ycguo@phy.ecnu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 王瑾玲; 郁铭; 杨云; 缪方明. TTA的席夫反应和分子力学、量化计算 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(05): 389-393
2. 袁瑞娟; 阮文娟; 朱必学; 曹小辉; 朱志昂. 新型手性双核Salen Mn的分子识别研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 139-145
3. 徐芬; 孙立贤; 谭志诚; 梁建国; 周丹红; 邸友莹; 兰孝征; 张涛. 阿司匹林的热解机理及热动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 50-54
4. 葛敏; 赵红卫; 张增艳; 王文锋; 余笑寒; 李文新. 两种联苯酚类化合物的太赫兹时域光谱研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 1063-1066
5. 陈虎; 许兴友; 高健; 杨绪杰; 陆路德; 汪信. 高氯化三邻菲啉合镍晶体结构研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 856-859
6. 康北笙; 郑康成; 张华新; 童叶翔; 温庭斌; 曹荣. Pd(Hmp)<sub>2</sub>(PB<sup>n</sup><sub>3</sub>)<sub>2</sub>的合成、晶体结构及其二聚机理[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 725-730

扩展功能

本文信息

PDF(1444KB)

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

▶ 量化计算

▶ 完全活性空间(CAS)

▶ 分子轨道

▶ 势能面

▶ Gaussian 98程序

本文作者相关文章

▶ 王珺

▶ 郭迎春

▶ 杨晓华

▶ 吴升海

▶ 刘煜炎

▶ 陈扬骥