

用改进的UTMO法解决SCF法中的多收敛点问题

丁涪江,张良辅,李广年

中国科学院成都有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用改进的分子轨道酉变换法(UTMO)解决了SCF法中的多收敛点困难.在选择酉变换的旋转角度时,先求出所有的对应于能量级小的角度值,然后从中选择对应于能量最小的角度值.

这样就考虑了整个能量超曲面的形状,从而能保证收敛到体系的基态,或有选择地收敛到激发态.在CNDO近似下,以具体算例说明了改进的UTMO法的应用.

关键词 [分子轨道](#) [微分重叠全忽略近似](#) [自洽场](#) [酉表示](#)

分类号 [0641](#)

## The solution of the multiconvergence point problem in SCF using improved UTMO method

DING FUJIANG,ZHANG LIANGFU,LI GUANGNIAN

### Abstract

**Key words** [MOLECULAR ORBIT](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [SELF-CONSISTENT FIELD](#) [UNITARY REPRESENTATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

### 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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

### 相关信息

▶ [本刊中 包含“分子轨道”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [丁涪江](#)

· [张良辅](#)

· [李广年](#)