

引用信息: Yang Zhongzhi; Yu Hengtai; Shen Erzhong; Wang Zhizhong; Zhang Gang. Acta Phys. -Chim. Sin., 1986, 2(03): 263-270 [杨忠志;于恒泰;沈尔中;王志中;张刚. 物理化学学报, 1986, 2(03): 263-270]

[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

### 定域分子轨道模型——含H、C、N、O有机小分子的研究

杨忠志; 于恒泰; 沈尔中; 王志中; 张刚

吉林大学理论化学研究所

摘要:

应用STO<sub>-3</sub>G从头算方法和Fostre-Boys定域化分子轨道程序, 我们研究了20多个有机小分子(含H、C、N、O)的定域化分子轨道, 获得了它们的能量和相互作用参数。采用定域分子轨道模型和统一的参数, 对正醇类分子进行了计算, 与光电子能谱数据比较, 得到的电离能的计算结果是相当令人满意的。

关键词:

收稿日期 1985-07-08 修回日期 1986-01-02 网络版发布日期 1986-06-15

通讯作者: 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\(2056KB\)](#)

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](#)

▶ [杨忠志](#)

▶ [于恒泰](#)

▶ [沈尔中](#)

▶ [王志中](#)

▶ [张刚](#)