

苯型烃的HMO-VB理论分析

朱宏耀,江元生

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 通过自旋相关分析,以投影Huckel波函数为近似基态波函数,计算了苯型烃的双电子自旋交替几率,与实验键长及前人的计算键长作了比较。给出了对基态波函数贡献最大的Kekule结构,其结果与共轭圈规则一致。

关键词 [芳香族烃](#) [分子轨道理论](#) [化学电源](#)

分类号 [0641](#)

Localized structure of benzenoid hydrocarbons based on spin-spin correlation analysis

ZHU HONGYAO,JIANG YUANSHEG

Abstract

Key words [AROMATIC HYDROCARBON](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [ELECTROCHEMICAL POWER SOURCE](#)

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“芳香族烃”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [朱宏耀](#)
- [江元生](#)