

研究论文

非交替烃HOMO、LUMO、LOMO能量计算

陈尔霆

沈阳化工学院

摘要:

本文将前文~[1,2]建议的直接计算交替烃HOMO(最高占据分子轨道)、LUMO(最低未占分子轨道)能量的方法推广到非交替烃。在HMO近似内, 对非交替烃分子的邻接矩阵联合应用逆迭代和Rayleigh商, 只需迭代一次就能得到该分子HOMO(或LUMO)能量的足够精确的结果。文中提出了计算的格式, 说明了选择初始变分函数的原则。用这种方法, 计算了30个分子的前线轨道~[3]能量, 平均误差为0.002 $\beta$ 。

本文提出了计算LOMO(最低占据分子轨道)能量的拓扑公式, 它同时适用于交替烃和非交替烃, 其计算精度要优于文献中曾经报道过的结果。

用例子说明了方法的应用。

关键词:

收稿日期 1984-09-15 修回日期 1985-01-19 网络版发布日期 1985-08-15

通讯作者: 陈尔霆 Email:

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1691KB)

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

▶ 陈尔霆