

气态肼的三种电子能谱和量子化学研究

阎存仙,刘洪霖

上海交通大学应用化学系;中国科学院上海冶金研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文应用X射线光电子能谱技术测得了气态肼的内层电子能谱、Auger电子能谱和价带电子能谱,对其电子结构进行了系统研究。又采用了不同能量的X射线为激发源,对比了Mg Ka和 Zr M:价带能谱,定性地获得了肼的分子轨道的组成。本文对肼电子能谱进行了量子化学研究,

用从头计算法给出了分子轨道波函数的成分,并指认了能谱,实验结果和计算值之间的一致性很好。

关键词 [计算](#) [量子化学](#) [X射线光电子谱法](#) [波函数](#) [电子结构](#) [从头计算法](#) [分子轨道理论](#) [联氨](#)

分类号 [0657](#)

X-ray photoelectron and x-ray induced auger electron spectroscopic study of gaseous hydrazine and their quantum mechanical studies

YAN CUNXIAN,LIU HONGLIN

Abstract

Key words [CALCULATION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROMETRY](#) [WAVE FUNCTIONS](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [MOLECULAR ORBITAL THEORY](#) [HYDRAZINE](#)

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“计算”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [阎存仙](#)

· [刘洪霖](#)