

螺旋对称(n1)构型高分子的LCAO/TO-LCTO/HO-LCHO/PO处理 I. 21 螺旋对称高分子能带的计算

王作新,曹维良,张敬畅,严继民,张启元

北京化工学院;中国科学院化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 螺旋高分子不同具有平移对称性, 而且有转动对称性. 我们用一种新的线性组合方法LCAO/TO-LCTO/HO-LCHO/PO(T---translation-periodic, H---helix-periodic)推导了螺旋对称高分子的久期方程,

使它的的建立和求解都大大为简化, 并使其阶数从 $n \times P$ (n 为螺旋轴的重数,也表示平移单元中包含的螺旋单元数; P 为每个螺旋单元中的原子轨道数)降为 P 阶. 本文还制定了直接解复广义本征值问题的EHMO 计算方案.

以聚乙烯和聚乙炔为例做了电子能带结构的计算.

关键词 [计算](#) [量子化学](#) [分子晶体](#) [能带结构](#) [构型](#) [聚乙炔](#) [电子能态](#) [螺形高聚物](#) [休克尔分子轨道](#)

分类号 [0641](#)

Treatment of the electronic energy bands of the helix-symmetrical high polymer by ical/to-lcto/ho-lcho/po

WANG ZUOXIN, CAO WEILIANG, ZHANG JINGCHANG, YAN JIMIN, ZHANG QIYUAN

Abstract

Key words [CALCULATION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [MOLECULAR CRYSTALS](#) [BAND STRUCTURES](#) [CONFIGURATION](#) [POLYACETYLENE](#) [ELECTRON ENERGY STATE](#) [SPIRO POLYMER](#) [HUCKEL](#) [MOLECULAR ORBITAL](#)

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

- [王作新](#)
- [曹维良](#)
- [张敬畅](#)
- [严继民](#)
- [张启元](#)