



北京大学

本科学位论文

题目：映射哈密顿量模型的研究与发
展

姓 名：贺 鑫

学 号：1500011805

院 系：化学与分子工程学院

专 业：化学专业

研究方向：理论与计算化学方向

导 师：刘剑教授

2019 年 6 月

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则一旦引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

摘要

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 `pkuthss` 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

关键词: 映射哈密顿量, 非绝热

The study and development of mapping Hamiltonian model

Xin He (Chemistry)

Directed by Prof. Jian Liu

ABSTRACT

Test of the English abstract.

KEYWORDS: mapping Hamiltonian, nonadiabatic

目录

第一章 引言	1
第二章 章节	3
第三章 结论和展望	5
参考文献	7
附录 A 附件	9
致谢	11
北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明	13

第一章 引言

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 `pkuthss` 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

第二章 章节

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 `pkuthss` 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

第三章 结论和展望

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 *pkuthss* 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

参考文献

- [1] Author. “Title” [J]. *Journal*, 2014-04-01.
- [2] 作者。“标题” [J]。期刊，2014-04-01。

附录 A 附件

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 `pkuthss` 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

致谢

pkuthss 文档模版最常见问题:

`\cite`、`\parencite` 和 `\supercite` 三个命令分别产生未格式化的、带方括号的和上标且带方括号的引用标记: 1, [2]、^[1,2]。

若要避免章末空白页, 请在调用 `pkuthss` 文档类时加入 `openany` 选项。

如果编译时不出参考文献, 请参考 `texdoc pkuthss` “问题及其解决”一章“上游宏包可能引起的问题”一节中关于 `biber` 的说明。

北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名： 日期： 年 月 日

学位论文使用授权说明

（必须装订在提交学校图书馆的印刷本）

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
- 学校有权保留学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；
- 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；
- 因某种特殊原因须要延迟发布学位论文电子版，授权学校在□一年/□两年/□三年以后在校园网上全文发布。

（保密论文在解密后遵守此规定）

论文作者签名： 导师签名： 日期： 年 月 日