

Пост Хартрі-Фоковські методи для H_2

1 Методи CI

Найбільш послідовний підхід до урахування кореляційних ефектів заснований на понятті електронно-збуджених конфігурацій, кожній з яких ставиться у відповідність певний слейтерівський детермінант. Електронно-збуджені конфігурації припускають інший розподіл електронів за спін-орбіталями у порівнянні з тим, як це реалізується в методі Хартрі—Фока. У зв'язку з різними можливими способами розподілу електронів розрізняють електронно-збуджені конфігурації (детермінанти) різної кратності збудження. Так, однократно-збуджені (single) конфігурації одержують, коли один з електронів переміщують із зайнятої спін-орбіталі на вакантну (рис. 14.6).

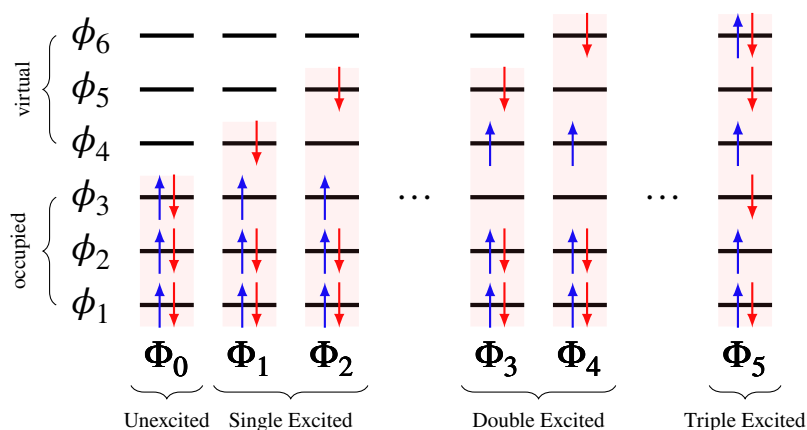


Рис. 1: