

图书基本信息

书名：<<基本原理和从头计算法量子化学（中册）>>

13位ISBN编号：9787030074737

10位ISBN编号：7030074734

出版时间：1985-5

出版时间：科学出版社

作者：徐光宪

页数：1078

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## 内容概要

《量子化学:基本原理和从头计算法(中册)》内容共八章。

第九、十两章讨论量子化学积分的计算方法,是以后各章的数学准备。

第十一、十二两章讨论原子结构的多重态理论和自治场计算方法。

第十三、十四两章讨论分子的自治场计算方法和电子相关问题。

以上六章包括了量子化学从头计算法的主要内容。

第十五、十六两章介绍近似算法中的模型势方法和自治场几方法,其它半经验的分子轨道理论,因已有专书,不再赘述。

《量子化学:基本原理和从头计算法(中册)》下册将进一步讨论量子化学的进展和某些专题。

书籍目录

第九章量子化学积分(一)Slater函数

§ 9.1引言

§ 9.2正交曲线坐标系

1.矢量微分算符

2.Laplace算符  $\nabla^2$ 在球坐标系的表达式

3.广义坐标系

4.Laplace算符在正交广义坐标系的表达式

5.椭圆坐标系

6.圆柱坐标系中的  $\nabla^2$

§ 9.3 $1/r_{12}$ 的展开式

1. $1/r_{12}$ 在球坐标系的展开式

2. $1/r_{12}$ 在椭圆坐标系中的展开式(Neumann展开)

§ 9.

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>