第一图书网, tushu007.com

<<基本原理和从头计算法量子化学 >

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洽场计算方法。
第十三、十四两章讨论分子的目洽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、十六两章介绍近似计算法中的模型势方法和目洽场几方法．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Δ2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Δ2
§9.31/r12的展开式
1.1/r12在球坐标系的展开式
2.1/r12在椭圆坐标系中的展开式(Neumann展开)
§9.

第一图书网, tushu007.com

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