

## <<量子化学中的计算方法>>

### 图书基本信息

书名：<<量子化学中的计算方法>>

13位ISBN编号：9787030219794

10位ISBN编号：7030219791

出版时间：2008-6

出版时间：科学出版社

作者：陈飞武

页数：208

字数：263000

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>

## <<量子化学中的计算方法>>

### 内容概要

本书主要介绍量子化学的基本原理和相应的计算方法，全书共8章，具体内容包括数学预备知识，量子力学导论，Hartree-Fock方程及自洽场计算，单电子和双电子积分计算，组态相互作用计算，微扰理论，耦合簇理论和约化密度矩阵理论。

本书可作为高等院校化学系物理化学专业、量子化学专业或其他相关专业研究生和大学高年级学生的教科书，也可供相关领域的科研人员阅读参考。

## &lt;&lt;量子化学中的计算方法&gt;&gt;

## 书籍目录

前言第1章 数学预备知识 1.1 矢量 1.1.1 矢量的定义 1.1.2 矢量的点积和长度 1.2 矩阵 1.2.1 矩阵的定义 1.2.2 矩阵的迹和点积 1.2.3 矩阵的转置 1.2.4 矩阵的加减法 1.2.5 矩阵的乘法 1.2.6 行列式 1.2.7 正定矩阵 1.2.8 矩阵的标准特征值问题 1.2.9 矩阵的广义特征值问题 1.3 各种常用矩阵 1.3.1 单位矩阵和逆矩阵 1.3.2 对角矩阵和三对角矩阵 1.3.3 下三角矩阵及其逆 1.3.4 Hermite矩阵和对称矩阵 1.3.5 酉矩阵和正交矩阵 1.4 行列式的计算 1.4.1 排列和置换 1.4.2 行列式的值 1.4.3 行列式的性质 1.4.4 行列式的Laplace展开 1.4.5 行列式和矩阵的求导 1.5 矢量的正交化 1.5.1 Schmidt正交化方法 1.5.2 对称正交化方法 (symmetrical orthogonalization) 1.5.3 正则正交化方法 1.6 线性变换 1.6.1 变换和线性变换 1.6.2 单位变换和逆变换 1.6.3 酉变换 1.6.4 相似变换 1.7 变分法 1.7.1 Hermite算符 1.7.2 变分原理 1.7.3 线性变分方法 参考文献第2章 量子力学导论 2.1 原子和分子体系的Schrodinger方程 2.1.1 Schrödinger方程 2.1.2 原子单位 2.1.3 Born—Oppenheimer近似 2.2 波函数 2.2.1 Pauli不相容原理与反对称性 2.2.2 Slater波函数 2.2.3 Laughlin波函数 2.2.4 Hattree波函数 2.3 哈密顿矩阵元的计算 2.3.1 单电子积分和双电子积分 2.3.2 Slater行列式与置换 2.3.3 Condon—Slater规则 2.4 角动量和自旋 2.4.1 算符对易和共同特征函数 2.4.2 角动量算符和阶梯算符 2.4.3 角动量算符和阶梯算符间的对易关系 2.4.4 单电子的自旋算符和波函数 2.4.5 多电子的自旋算符和波函数 参考文献第3章 Hartree-Fock方程及自洽场计算 3.1 Hartree—Fock方程 3.1.1 Slater行列式和总能量 3.1.2 Hartree-Fock方程的推导 3.2 Hartree—Fock方程的性质 3.2.1 轨道能量 3.2.2 电离势、电子亲和势和Koopmans定理 3.2.3 电子单重激发和Brillouin定理 3.3 闭壳层体系 3.3.1 自旋限制的闭壳层Slater行列式 3.3.2 自旋限制的闭壳层RHF方程 3.3.3 Roothaan方程 3.3.4 电荷密度和布居数分析 3.3.5 氢分子 3.4 开壳层体系 3.4.1 自旋限制的开壳层ROHF方程 3.4.2 自旋非限制的开壳层UHF方程 3.4.3 Pople-Nesbet方程 3.4.4 自旋密度分布 3.5 自洽场迭代计算 3.5.1 能级移动方法 3.5.2 Pulay的DIIS方法 3.6 大小一致性和氢分子的离解 3.6.1 电子总能量的大小一致性 3.6.2 氢分子的离解行为 参考文献第4章 单电子和双电子积分计算 4.1 Gauss基函数的单电子积分 4.1.1 Gauss基函数 4.1.2 Gauss基函数的乘积 4.1.3 一维Gauss型数值积分 4.1.4 重叠积分 4.1.5 动能积分 4.1.6 核吸引势能积分 4.2 Gakiss基函数的双电子积分 4.2.1 1s型双电子积分 4.2.2 Dupuis-ays-King方法 4.2.3 McMurchieDavidson方法 参考文献第5章 组态相互作用计算第6章 微扰理论第7章 耦合簇理论第8章 约化密度矩阵理论参考文献

## <<量子化学中的计算方法>>

### 编辑推荐

《量子化学中的计算方法》由科学出版社出版。

<<量子化学中的计算方法>>

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>