

<<量子化学-基本原理和从头计算法>>

图书基本信息

书名：<<量子化学-基本原理和从头计算法 (中册)>>

13位ISBN编号：9787030220394

10位ISBN编号：7030220390

出版时间：2009-6

出版时间：科学出版社

作者：徐光宪,徐乐民,王德民

页数：585

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-基本原理和从头计算法>>

前言

《量子化学——基本原理和从头计算法》第一版是在我们为北京大学化学系和中国科学院化学研究所的研究生开设量子化学课程编写的讲义的基础上写成的，从1980年开始分上、中、下三册陆续出版。

上册主要讲述量子力学的基本原理、量子力学处理化学问题的基本方法和得到的普遍性重要结论，同时介绍用量子化学方法处理问题必须掌握的数学基础知识，如矩阵运算、线性常微分方程的解法和特殊函数、群论基础知识等。

中册讲述重要的量子化学计算方法，比较详尽地介绍其理论基础、计算公式、计算过程和具体计算中涉及的问题，并注意介绍量子化学计算方法的新进展，尽量接近学科发展前沿。

下册介绍重要的高级理论方法，为读者深入开展量子化学研究打基础。

该书自出版发行以来，得到读者较好的评价。

有较多学校采用为教材，也成为很多出国留学人员携带的参考书。

读者对该书全面系统介绍量子化学内容和论述详尽、容易读懂的特色表示肯定。

也有读者来信指出该书存在的一些问题，如一些印刷错误和表述不够严谨之处。

我们衷心感谢读者对我们的鼓励和批评指教。

近三十年来，得益于计算技术进步提供的有力支持，量子化学得到迅速的发展。

量子化学计算在化学和相邻学科中发挥的作用越来越大，有越来越多的人在自己的工作中采用量子化学方法。

很多人有深入学习量子化学知识的要求，需要比较全面系统的教材。

另一方面，由于量子化学的蓬勃发展，近年来有很多新的重要研究成果，在量子化学教材中显然应该增添相关的内容。

因此我们觉得有必要将《量子化学——基本原理和从头计算法》一书修订再版。

<<量子化学-基本原理和从头计算法>>

内容概要

《量子化学—基本原理和从头计算法》（第二版）分为上、中、下三册。上册讲述量子力学的基本原理、处理问题的基本方法和数学工具以及最重要的普遍性结论，中册介绍重要的量子化学计算方法，下册介绍量子化学研究的高级理论方法。

本书是中册，共有8章，第9章介绍量子化学积分（一）Slater函数，第10章介绍量子化学积分（二）Gauss函数，第11、12章分别介绍原子结构的多重态理论和原子结构的自洽场计算，第13章介绍分子的自洽场计算，第14章介绍电子相关问题，第15章介绍密度泛函理论方法，第16章介绍有效芯势方法。

本书可作为量子化学专业研究生教材或者教学参考书，也可供对量子化学基础知识要求比较高的大学高年级学生以及相关专业的教师和科研人员学习参考。

<<量子化学-基本原理和从头计算法>>

书籍目录

第二版序 第一版序 第9章 量子化学积分 (一) Slater函数 9.1 引言 9.2 正交曲线坐标系 9.3 $1/r_{12}$ 的展开式 9.4 某些有用的定积分 9.5 单中心积分 9.6 双中心积分 参考文献 习题
第10章 量子化学积分 (二) Gauss函数 10.1 Gauss函数 10.2 用GTO拟合STO 10.3 函数及有关定积分 10.4 GTO乘积定理 10.5 GTO的归一化 10.6 重叠积分 10.7 动能积分 10.8 不完全函数 $F_m(W)$ 10.9 $1s$ 型电子-核吸引能积分 10.10 $1s$ 型电子排斥能积分 10.11 广义GTO的势能积分 参考文献 习题 第11章 原子结构的多重态理论 第12章 原子结构的自洽场计算 第13章 分子的自洽场计算 第14章 电子相关问题 第15章 密度泛函理论方法 第16章 有效芯势方法

<<量子化学-基本原理和从头计算法>>

编辑推荐

量子化学——基本原理和从头计算法 三“基”——基本原理、基本方法、基础知识 三“
新”——新理论、新发展、新成果 全面系统，论述详尽，重点突出 量子化学经典教材

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>