

图书基本信息

书名：<<量子化学基本原理和从头计算法（上册）>>

13位ISBN编号：9787030074720

10位ISBN编号：7030074726

出版时间：1999-5

出版时间：科学出版社

作者：徐光宪 黎乐民

页数：503

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:基本原理和从头算法(上)》内容简介:《量子化学:基本原理和从头算法》分三册出版。

上册主要介绍量子力学的基本原理,必要的数学工具——矩阵与群论,以及自由粒子、势附中的粒子、谐振子和氢原子等简单体系的Sob中山nger方程的精确解,为阐述量子化学的从头i十算法准备了必要的理论基础。

中册主要讨论多电子原子和多原子分子的电子结构的从头算法的理论、方法和应用。

内容包括星子化学积分, Roothaan-Hartree-Fock自洽场分子轨道理论, 组态叠加和其它电子相关能的算法, 从头算法的应用等。

下册进一步深入讨论一些星子化学方面的专题。

书籍目录

第一章矩阵

1.1矩阵的由来、定义和运算方法

1.矩阵的由来

2.矩阵的定义

3.矩阵的相等

4.矩阵的加减法

5.矩阵和数的乘法

6.矩阵和矩阵的乘法

7.转置矩阵

8.零矩阵

9.矩阵的分块

1.2行矩阵和列矩阵

1.行矩阵和列矩阵

2.行矢和列矢

3.Dirac符号

4.矢量的标积和矢量的正交

5

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>