

<<量子化学计算方法与应用>>

图书基本信息

书名：<<量子化学计算方法与应用>>

13位ISBN编号：9787030126160

10位ISBN编号：7030126165

出版时间：2004-5

出版时间：科学出版社

作者：林梦海

页数：256

字数：323000

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>

<<量子化学计算方法与应用>>

内容概要

本书主要介绍进行量子化学计算所必需的理论基础与分子轨道理论、价键理论、密度泛函等从头算方法和一些半经验方法，并结合计算实际提供一些应用实例。

此外，还简要介绍了国际理论界近年发展起来的组合方法、遗传算法与神经网络等计算方法。

本书可作为实验化学家进行理论计算的入门书，也可作为化学、生命科学、材料科学等领域的研究生教材。

<<量子化学计算方法与应用>>

书籍目录

前言第1章 量子化学计算简介 1.1 量子化学计算发展史 1.2 理论化学发展现状 参考文献第2章 基本原理和半经验方法 2.1 MO-SCF基本原理 2.2 几种主要的半经验算法 参考文献第3章 分子轨道方法(上) 3.1 从头算程序结构与输入 3.2 基函数的选择 3.3 主要积分计算 3.4 自洽场计算 3.5 分子性质 参考文献第4章 分子轨道方法(下) 4.1 几何构型优化与能量梯度法 4.2 势能面 4.3 电子相关与多体微扰理论 4.4 组态相互作用 4.5 电子相关的其他方法 参考文献第5章 价键理论 5.1 价键方法及早期工作 5.2 广义价键方法GVB 5.3 键表西群——对不变式方法 5.4 现代价键理论新进展 参考文献第6章 密度泛函理论 6.1 密度矩阵方法 6.2 Thomas-Fermi及相关模型 6.3 Kohn-Sham方法 6.4 自旋密度泛函方法 6.5 SlaterXa方程 6.6 离散变分Xa方法 6.7 梯度校正方法 6.8 杂化方法 参考文献第7章 初步应用 7.1 计算模型与方法的选择 7.2 自洽场迭代和收敛问题 7.3 分子波函数的解释 7.4 定域分子轨道 7.5 能量分析 参考文献第8章 专题应用 8.1 分子光谱 8.2 溶剂效应 8.3 化学反应途径与IRC近似 8.4 固体表面吸附 参考文献第9章 分子模拟 9.1 分子模拟简介 9.2 原子间相互作用势 9.3 相关算法 9.4 分子动力学模拟 9.5 Monte Carlo方法 参考文献第10章 计算化学进展 10.1 QM/MM组合方法 10.2 线性比率方法 10.3 遗传算法 10.4 神经网络 参考文献

<<量子化学计算方法与应用>>

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>