<<计算化学>>

图书基本信息

书名：<<计算化学>>

13位ISBN编号：9787030332998

10位ISBN编号：7030332997

出版时间：2012-1

出版时间：科学

作者：里沃斯

页数：664

<<计算化学>>

内容概要

重要的概念（例如，分子力学，从头计算、半经验及密度泛函理论）都辅以其扼要的历史背景和顶尖科。
学家的人物介绍。
计算化学基础理论构架的阐述都配以清晰的计算实例。
2003年第1版以来直到2009年底的学科重要进展，都已纳入本版中。
增加了第1版未涉及的内容，例如，溶剂化效应，如何做CASSCF计算，过渡元素等。
每章章末附有习题，用于测试读者的理解程度。
至于较难的习题，其中有些没有直接明确解的，可到书末寻找答案。
附有大量参考文献，可以帮助读者核查所有关键论点的基础，启发深入思考。
使得《计算化学:分子和量子力学理论及应用导论(原著第2版)》不仅是教科书，还是一部极具参考价值的科学著作。

《计算化学:分子和量子力学理论及应用导论(原著第2版)》特别适合计算化学和理论化学专业的高年级本科生和研究生、科研院所和企业从事计算化学相关领域的专业人员，同时也可用于自学和指导用书。

作者简介

作者：(加拿大)里沃斯(Errol G.Lewars)

书籍目录

章节摘录

版权页：插图：Molecular mechanics is based on a model of a molecule as a collection of balls （atoms） held together by springs （bonds）. If we know the normal spring lengths and the angles between them, and how much energy it takes to stretch and bend the springs, we can calculate the energy of a given collection of balls and springs, i.e. of a given molecule; changing the geometry until the lowest energy is found enables us to do a geometry optimization, i.e. to calculate a geometry for the molecule. Molecular mechanics is fast: a fairly large molecule like a steroid （e.g.cholesterol, C27H460） can be optimized in seconds on a good personal computer.Ab Initio calculations （ab initio, Latin: "from the start", i.e. from first princi- ples"） are based on the Schrodinger equation. rfliis is one of the fundamental equations of modem physics and describes, among other trungs, how the eectrons in a molecule behave. The ab initio method solves the Schrodinger equation for a molecule and gives us an energy and wavefunction. The wavefunction is a mathe matical function that can be used to calculate the electron distribution （and, in theory at least, anything else about the molecule）. From the electron distribution we can tell things like how polar the molecule is, and which parts ofit are likely to be attacked by nucleophiles or by electrophiles.

编辑推荐

《计算化学:分子和量子力学理论及应用导论(原著第2版)(英文版)》是由国外化学经典教材系列(影印版)。

版权说明