

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	5
Предисловие авторов	7
Глава 1. Введение	10
1.1. Уравнение Шредингера	10
1.2. Атом гелия	16
Первое приближение	16
Симметрия волновой функции	19
Влияние электронного спина	21
Классификация электронных состояний	25
1.3. Молекула водорода	29
Список литературы	32
Глава 2. Математические методы	34
2.1. Разложения по полным наборам	34
2.2. Векторные пространства и матрицы	39
2.3. Уравнение на собственные значения	43
2.4. Уравнение на собственные значения. Другие приближенные методы	52
Список литературы	57
Глава 3. Многоэлектронные волновые функции	58
3.1. Антисимметрия и метод Слейтера	58
3.2. Вычисление энергии для атома гелия	62
3.3. Матричные элементы между антисимметризованными функциями-произведениями	66
3.4. Конфигурационное взаимодействие	71
3.5. Молекула водорода	77
3.6. Спиновые собственные функции	83
Метод спиновых спариваний	88
Метод диаграммы ветвления	91
Теоретико-групповой метод	93
Методы проекционных операторов	98
Список литературы	101

Глава 4. Природа электронного распределения	102
4.1. Электронные функции плотности	102
Пример	105
4.2. Обобщенные функции плотности	107
4.3. Функции плотности в однодетерминантном приближении	113
4.4. Функции плотности перехода и многодетерминантные вол- новые функции	119
4.5. Анализ заселенностей	122
4.6. Естественные спин-орбитали и разложение метода КВ .	125
4.7. Одноэлектронные величины	127
Изменение потенциального поля. Примеры	129
4.8. Парная корреляционная функция	132
4.9. Функции спиновой плотности	136
Список литературы	142
Глава 5. Молекулярные орбитали и метод самосогласованного поля	144
5.1. Метод Хартри—Фока. Замкнутые оболочки	144
5.2. Неограниченный метод Хартри—Фока	153
5.3. Другие свойства функции плотности	158
5.4. Метод Хартри—Фока. Открытые оболочки	164
Обобщение теории открытой оболочки	170
5.5. Физический смысл молекулярных орбиталей. Локализация химических связей	174
Делокализованные орбитали	175
Локализованные орбитали	179
5.6. Многодетерминантный метод ССП	183
Список литературы	189
Глава 6. Метод валентных связей	190
6.1. Элементарная теория Гайтлера—Лондона	190
6.2. Спиновое вырождение и перестановки	195
6.3. Приближение идеального спаривания и электронный резо- нанс	199
Приближение идеального спаривания	202
Общее приближение	205
6.4. Точные расчеты по методу КВ на основе метода ВС	208
Пример. Триpletное состояние бутадиена	213
Список литературы	219
Глава 7. Современное развитие теории	220
7.1. Исторический обзор работ по улучшению волновых функций	220
Атомы	220
Молекулы	223

7.2. Обобщенные функции-произведения	225
7.3. Вариационная теория возмущений для определения электрон- ных групповых функций	232
7.4. Кластерное разложение волновой функции	239
7.5. Парные корреляционные функции	246
Список литературы	256
Глава 8. Взаимодействие с электрическими и магнитными полями	257
8.1. Классическая теория	257
8.2. Строгая релятивистская теория. Одна частица	263
8.3. Полная релятивистская теория. Много частиц	267
8.4. Использование теории возмущений	269
8.5. Отдельные взаимодействия	273
8.6. Простой пример	276
8.7. Интерпретация параметров спинового гамильтониана	281
Электрон-ядерное контактное взаимодействие (первый по- рядок)	282
Электрон-ядерное дипольное взаимодействие (первый по- рядок)	284
Электронное спин-спиновое взаимодействие (первый порядок)	285
Химические сдвиги (второй порядок)	286
Значения g -фактора (второй порядок)	290
Электронное спин-спиновое взаимодействие (второй порядок)	292
Ядерное спин-спиновое взаимодействие (второй порядок)	294
Список литературы	297
Глава 9. Расчет электронных волновых функций	298
9.1. Введение	298
9.2. Примеры неэмпирических вычислений	300
9.3. Вычислительные аспекты неэмпирических расчетов	304
9.4. Современное состояние неэмпирических вычислений	315
9.5. Модели и полуэмпирические вычисления	320
Модель свободных электронов	321
Модель Хюккеля	322
Полуэмпирические теории	324
9.6. Заключение	331
Список литературы	332
Приложения	334
I. Основные положения квантовой механики	334
Операторы	335
Квантовое состояние системы	335
Оператор Гамильтона	335
Средние значения и собственные значения	336
Список литературы	337

II. Атомные орбитали и угловые моменты	337
Список литературы	344
III. Симметрия и основные теоретико-групповые концепции	
Симметрия волновых функций	344
Вырождение	349
Специальные теоремы	352
Список литературы	355
IV. Релятивистские члены в гамильтониане	358
Форма Паули уравнения Дирака	358
Уравнение Брейта и его преобразование	364
Список литературы	371
Предметный указатель	372