
目录

第三版前言ix
致谢xi
照片和图形来源.....	xii
1: 计算在化学研究中的应用	1
什么是电子结构理论?	3
研究问题实例: 维生素E.....	4
选择初始计算	6
策划并执行计算.....	7
理论模型逐级推进: 模型化学	8
化学模型和真实分子	16
预测感兴趣的性质	18
化学环境模拟.....	21
计算和实验的结合	23
原子单位制	29
进阶主题	29
处理第三行之后的元素	29
数值积分和网格	30
密度拟合基组.....	31
2: 计算入门	33
第一步: 对甲醛的能量计算	35
构建和执行计算	36
了解高斯输入文件	45
高斯计算结果	46
解读能量和能量差	47
偶极矩和更高阶多极矩.....	48
分子轨道	49
原子电荷分布	51
关于能量和轨道的更多内容	52
何时能量可以 (或不可以) 用来比较	52
开壳层体系的模拟	54
双正交轨道	55
分子结构能量极小化: Opt+Freq计算	57
热能校正.....	59

清理与优化.....	59
大体系的模拟：高斯的ONIOM功能	61
练习	65
进阶主题和练习	71
波函数稳定性	71
比较模型化学方法的精确性	73
深入研究基组	78
理解CPU资源需求	81
3: 几何结构优化	85
势能面	87
寻找势能面上的驻点	88
优化收敛标准	88
检查优化结果	89
寻找过渡态结构	97
驻点的表征	102
解读简正模式信息	105
练习	110
进阶主题和练习	117
适用于处理优化困难情况的策略	117
4: 化学性质预测	139
频率计算结果：IR和Raman光谱	143
校正频率	144
理解和解释频率数据	148
IR和Raman光谱的应用	148
同位素取代	153
热化学模拟	154
为什么和怎样模拟热化学量	155
追求高精度能量的复合模型化学	157
在GaussView和WebMO中查看NMR数据	163
构象寻找和玻尔兹曼平均	164
练习	170
进阶主题和练习	182
更多关于振动性质计算的内容	182
材料性质：极化率、超极化率和第二超极化率(γ)	190
高精度热化学和波函数稳定性	197
5: 溶液中的化学模拟	199
连续介质溶剂化模型	201
腔体形状	202
逃逸电荷与静电方程	202

设置高斯的溶剂化计算.....	203
溶液中的性质	206
热力学量的预测	207
溶液中的自由能预测：SMD方法	207
基于SMD的其他溶剂化模型	209
练习	211
进阶主题和练习.....	216
包含显性溶剂分子	216
更多关于溶液中自由能的内容	221
 6: 反应机理的研究.....	227
通过曲面可视化理解反应性	229
势能面的研究	236
势能面扫描	237
反应路径.....	244
运行IRC计算	244
等键反应	250
等键反应和赫斯定律的局限性	251
练习	253
进阶主题和练习.....	265
多变量扫描	267
S _N 2 反应	271
 7: 光谱预测.....	275
NMR光谱：不仅仅是化学位移	278
NMR屏蔽张量分量	278
NMR自旋-自旋耦合常数	279
振动圆二色性	281
构象平均	284
拉曼旋光	288
VCD和ROA光谱的溶剂效应	292
旋光性	295
模拟溶液中的ORD	297
关于玻尔兹曼平均的最后说明	298
练习	299
进阶主题和练习.....	318
微波光谱和超精细耦合常数	318
 8: 激发态模拟.....	327
化学和光：激发态	329
研究激发态的模型化学方法	330
垂直跃迁能和紫外 / 可见光谱的预测	331

确定一个激发态的对称性.....	334
振子强度.....	335
自然跃迁轨道.....	341
高精度激发态.....	342
电子圆二色谱	344
荧光预测：激发态几何结构的优化.....	347
练习	350
进阶主题和练习	363
弗兰克-康登（Franck-Condon）分析.....	363
采用特定态溶剂化方法模拟发射.....	370
采用CASSCF方法研究基态和激发态.....	380
定位圆锥交叉点.....	385
受限活化空间自洽场（RASSCF）	389
9: 高级模拟技术	397
准备生物体系ONIOM计算输入文件	399
寻找并选择PDB文件	400
了解PDB文件	402
PDB文件难点	404
为GFP准备高斯输入文件.....	406
相对论效应	438
弱相互作用体系：色散与平衡校正.....	441
分子体系中的电子自旋分配	445
两个开壳层系统的例子	445
反铁磁耦合	447
势能面上的自旋态	450
练习	453
10: 理论背景	463
数学和量子力学	465
薛定谔方程与分子哈密顿量.....	467
对波函数的限制.....	469
Hartree-Fock理论	470
分子轨道与基组.....	470
电子自旋算子	472
构建Hartree-Fock波函数	472
变分原理与自洽场（SCF）方法	473
Roothaan-Hall 方程	474
开壳层体系和非限制性波函数	477
电子相关方法	481
组态相互作用	482
耦合簇理论	483

CCSD的三重校正.....	484
Møller-Plesset微扰理论.....	484
密度泛函理论	486
杂化泛函.....	487
长程校正.....	491
双杂化泛函	492
色散	492
积分格点和DFT计算	493
Petersson的完全基组外延.....	495
激发态方法	497
完全活化空间自洽场 (CASSCF)	498
参考文献	501
索引	521