

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