

勘误 (2024 年 9 月)

1. 第 21 页, 公式 1.130, “当且仅当”改为“当”。
2. 第 35 页, 倒数第 4 行, “方程 (2.31)”改为“方程 (2.30)”。
3. 第 36 页, 公式 2.36 第二行,

$$\begin{aligned} |j\rangle &= \hat{I}|j\rangle = (\hat{P}_j + \hat{Q}_j) |j\rangle \\ &= |j^{(0)}\rangle \langle j^{(0)}|j\rangle + (E_j^{(0)} - \hat{H}_0)^{-1} \hat{Q}_j (\hat{H}' - \Delta_j) |j\rangle \end{aligned}$$

应改为

$$\begin{aligned} |j\rangle &= \hat{I}|j\rangle = (\hat{P}_j + \hat{Q}_j) |j\rangle \\ &= |j^{(0)}\rangle \langle j^{(0)}|j\rangle + (E_j^{(0)} - \hat{H}_0)^{-1} \hat{Q}_j (\hat{H}' - \Delta_j) |j\rangle \end{aligned}$$

4. 第 42 页公式 2.72, 加和符号应该在括号外面, 如下式所示。

$$\sum_j^K (H_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0 \quad (2.72)$$

5. 第 48 页, 公式 3.29 中的第二个等于号改为约等符号。
6. 第 76 页, 公式 3.218 中的加和下标应加上 k,l

$$\gamma_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) = \sum_{i,j,k,l} G_{ij,kl} \chi_i(\mathbf{x}_1) \chi_j(\mathbf{x}_2) \chi_k^*(\mathbf{x}'_1) \chi_l^*(\mathbf{x}'_2)$$

7. 第 101 页, 公式 4.137 式中, $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$ 前应分行, 写成如下形式,

$$\begin{aligned} \phi_\mu(\mathbf{r}) &= \phi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\mu) \\ \phi_{nlm}(\mathbf{r}) &\equiv \phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

8. 第 106 页, 表 4.1 中第一列中出现的 v 都应改为大写 V 。
9. 第 113 页, 图 4.7 有误, 正确的图应该是下图:

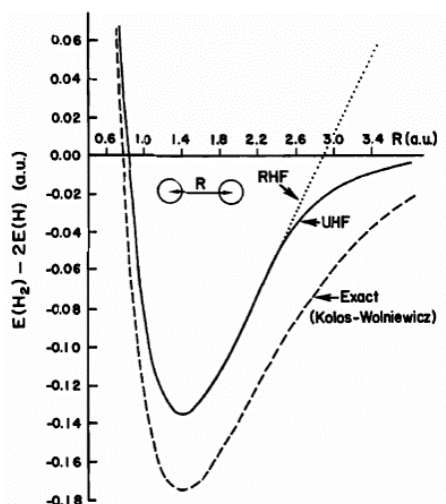


图 4.7 H₂解离曲线，RHF 和 UHF 结果使用了 6-31G(d,p) 基组。摘自 A. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Figure 3.19, p227。

10. 第 113 页，倒数第二行

$|\psi_1(\mathbf{r})|^2$ 和 $|\psi_2(\mathbf{r})|^2$ 都满足左右对称性，但 $\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})$ 不满足，为使 $\rho(\mathbf{r})$ 满足左右对称性，应改为

$|\psi_1(\mathbf{r})|^2$ 和 $|\psi_2(\mathbf{r})|^2$ 都满足左右对称性，但 $\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})$ 不满足，为使 $\rho(\mathbf{r})$ 满足左右对称性，

11. 第 116-117 页，表 4.6 和 4.8 倒数第二行，第一列，“G-311++G(3df,3dp)”应改为“6-311++G(3df,3dp)”。

12. 第 131 页，公式 5.68

$$\begin{aligned}
 |\Psi_0\rangle & \equiv |\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle + c_1|\Phi_{1_1\bar{1}_1}^{2_1\bar{2}_1}\rangle + c_2|\Phi_{1_2\bar{1}_2}^{2_2\bar{2}_2}\rangle \\
 & \equiv |\Phi_0\rangle + c_1|\Phi_1\rangle + c_2|\Phi_2\rangle
 \end{aligned}$$

应改为

$$\begin{aligned}
 |\Psi_0\rangle & = |\Phi_0\rangle + c_1|\Phi_{1_1\bar{1}_1}^{2_1\bar{2}_1}\rangle + c_2|\Phi_{1_2\bar{1}_2}^{2_2\bar{2}_2}\rangle \\
 & \equiv |\Phi_0\rangle + c_1|\Phi_1\rangle + c_2|\Phi_2\rangle
 \end{aligned}$$

13. 第 134 页，表 5.2 第一行最后一列，应改为“偶极矩 (a.u.)”。

14. 第 139 页，倒数第 5 行第一个字应为“端”。

15. 第 140 页

表 5.3 第二行，右侧公式应为

$$E_c^{(2x)} = \frac{1}{2}(-1)^{2+1} \sum_{a,b,r,s} \frac{\langle ab|rs\rangle \langle rs|ba\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_r - \varepsilon_s}$$

表 5.3 第四行，左侧用 b 标注的线应该是向下的箭头。

16. 第 141 页，图 5.4 中第二个图中，用 b 标志的线应带向下的箭头。

17. 第 145 页，公式 5.125 应该为

$$|\Psi_0^{(CI)}\rangle = \left(1 + \sum_{i=1}^n \hat{C}_i\right) |\Phi_0\rangle$$

18. 第 159 页，公式 6.21 上面一行，“更具体讨论可参考文献[4]第二章”应改为，“更具体讨论可参考文献[4]第三章”。

19. 第 159 页，公式 6.23 中的小于等于号 \leq 应该为小于号 $<$ 。

20. 第 170 页，公式 6.115 前一行结尾五个字应改为“称为凸函数”。

21. 第 172 页，图 6.4 式，LDA 之上的第二阶，mGGA 应改为 GGA。

22. 第 198 页，文献[64]第一作者名应为“文振翼”。