

勘误 (2024 年 2 月)

(说明：以下错误已在第二次印刷部分得到修正)

1. 第 21 页，公式 1.130 右侧括号中“且仅当”应删去。
2. 第 35 页，倒数第 4 行，“方程 (2.31)” 改为 “方程 (2.30)”。
3. 第 36 页，2.36 式第二行中， $=|j^{(0)}\rangle\langle j^0|j\rangle$ 应改为 $=|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|j\rangle$ 。
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 61 页，3.116 式应改为如下，

$$\begin{aligned} \hat{s}_+|\alpha\rangle &= 0, \quad \hat{s}_+|\beta\rangle = \hbar|\alpha\rangle \\ \hat{s}_-|\alpha\rangle &= \hbar|\beta\rangle, \quad \hat{s}_-|\beta\rangle = 0 \end{aligned}$$

7. 第 76 页，公式 3.218 中的加和下标应加上 k,l

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

8. 第 106 页，108 页，为了与正文中符号一直，表 4.1，4.2，4.3 中 cc-pvnZ(n=D,T,Q,5,6)都应改为 cc-pVnZ。
9. 第 107 页，公式 4.149 上面第二行，“均横修正”应改为“均衡修正”。
10. 第 113 页，图 4.7 有误，正确的图应该是下图：

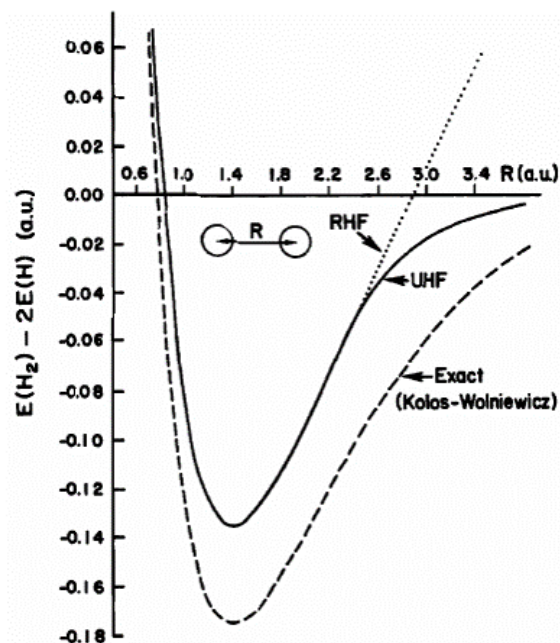


图 4.7 H_2 解离曲线, RHF 和 UHF 结果使用了 6-31G(d,p) 基组。摘自 A. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Figure 3.19, p227。

11. 第 116 页, 117 页, 表 4.6 和 4.8 倒数第二行, 第一列, "G-311++G(3df,3dp)" 改为 "6-311++G(3df,3dp)"。
12. 第 131 页, 5.68 式第一个等号及后面的波函数符号多余, 应去掉。
13. 第 134 页, 表 5.2, 第三列第一行, "偶极矩" 后加上 "(Debye)"。
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 改为

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

18. 第 170 页，公式 6.115 前一行结尾五个字应改为“称为凸函数”。
19. 第 198 页，文献[64]第一作者名应为“文振翼”。