

勘误 (2023 年 6 月)

1. 第 35 页, 倒数第 4 行, “方程 (2.31)”改为“方程 (2.30)”。
2. 第 42 页公式 2.72, 加和符号应该在括号外面。

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

3. 第 76 页, 公式 3.218 中的加和下标应加上 k,l

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

4. 第 113 页, 图 4.7 有误, 正确的图应该是下图:

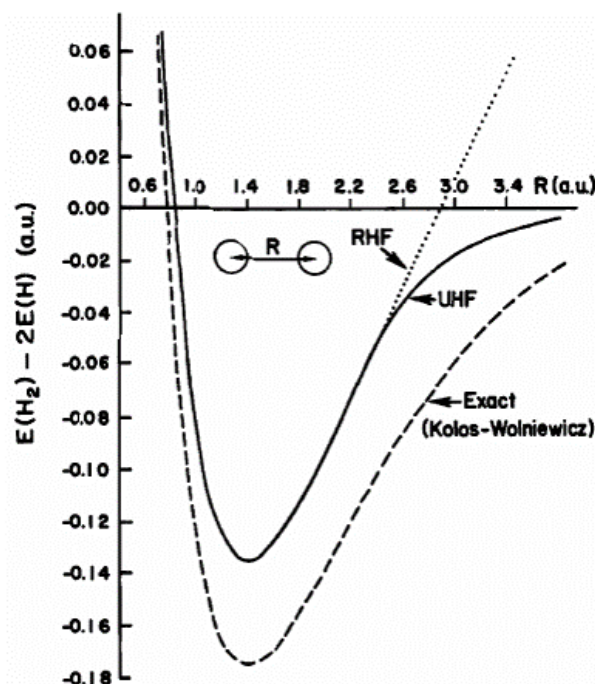


图 4.7 H₂ 解离曲线, RHF 和 UHF 结果使用了 6-31G(d,p) 基组。摘自 (A. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Figure 3.19, p227)

5. 第 139 页, 倒数第 5 行第一个字应为“端”。
6. 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。

7. 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。
8. 第 145 页, 公式 5.125 应该为

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

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