

به نام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان - دانش‌گدهی فیزیک

تمرین سری ۱۲ - ساختار الکترونی

سه شنبه ۱۸ خرداد ۱۳۹۳

---

۱. معادلات هارتری را از روش وردش بدست آورید.

مرجع:

American Journal of Physics, vol.33,pp.433 (1965)

---

۲. معادلات هارتری-فوک را از روش وردش بدست آورید.

مرجع:

American Journal of Physics, vol.33,pp.433 (1965)

---

۳. معادلات Roothaan-Hall را برای تقریب هارتری-فوک پوسته بسته (RHF) بدست آورید.

مرجع:

Introduction to Computational Chemistry by Frank Jensen

---

«موفق باشید»