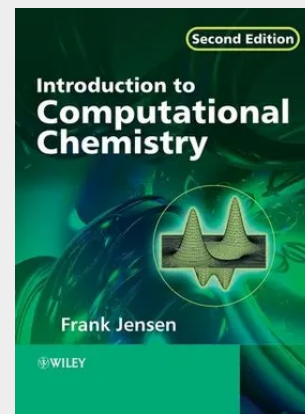


Introduction to Computational Chemistry

Introduction to Computational Chemistry Second Edition provides a comprehensive account of the fundamental principles underlying different methods, ranging from classical to the sophisticated. Comprehensive in its coverage, this textbook focuses on calculating molecular structures and (relative) energies.

Introduction to Computational Chemistry Second Edition provides a comprehensive account of the fundamental principles underlying different methods, ranging from classical to the sophisticated. Although comprehensive in its coverage, this textbook focuses on calculating molecular structures and (relative) energies and less on molecular properties or dynamical aspects. No prior knowledge of concepts specific to computational chemistry are assumed, but the reader will need some understanding of introductory quantum mechanics, linear algebra, and vector, differential and integral calculus.

Vom klassischen Ansatz zur ausgefeilten modernen Spezialmethode: Dieses einführende Lehrbuch erklärt Ihnen alle theoretischen Modelle der Computational Chemistry. Der Schwerpunkt liegt vorrangig auf der Berechnung von Molekülstrukturen und relativen Energien; Eigenschaften und dynamische Aspekte spielen weniger eine Rolle. Anfängergeeignet -- Grundkenntnisse der Quantenmechanik, linearen Algebra, Vektorrechnung und Infinitesimalrechnung sind erforderlich, Spezialkenntnisse in Computational Chemistry müssen aber nicht mitgebracht werden.



58,70 €

54,86 € (zzgl. MwSt.)

Nicht mehr lieferbar

Artikelnummer: 9780470011874

Medium: Buch

ISBN: 978-0-470-01187-4

Verlag: Wiley-Blackwell

Erscheinungstermin: 20.10.2006

Sprache(n): Englisch

Auflage: 2. Auflage 2006

Produktform: Kartoniert

Gewicht: 1178 g

Seiten: 620

Format (B x H): 189 x 250 mm

