

<<最弱受约束电子理论及应用>>

图书基本信息

书名：<<最弱受约束电子理论及应用>>

13位ISBN编号：9787312022869

10位ISBN编号：7312022863

出版时间：2010-3

出版时间：中国科学技术大学出版社

作者：郑能武

页数：222

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 前言

事物的外在是纷繁复杂的，但其内在本质则是简单的。

无数科学的定理、定律、规律、原理、理论等都证明了这一点。

作者在建立最弱受约束电子理论（Weakest Bound Electron Theory，缩写为WBE Theory）和撰写本专著的过程中，始终秉承这一理念，以求到达事物内在本质的境地。

作者把最弱受约束电子概念引入理论化学之中，并在波粒二象性之上建立起最弱受约束电子理论。

它既满足全同粒子不可分辨性（indistinguishability）和泡利（Pauli）原理的要求，又突显了单个粒子的特性，为粒子间的近似可分离性（separability）找到了理论依据。

量子力学中精确可解的单电子体系之一——氢原子——中的电子是体系的最弱受约束电子，因此，它也应该被理论所涵盖。

把波粒二象性统一在电子结构的量子理论中，并再现原子、分子的性质和规律，是一件很难的事情，各种量子理论和方法的提出及发展都表明了这一点。

最弱受约束电子理论目前还只是一个框架，毫无疑问，它不但要吸纳已有量子理论和方法中极其丰富的成果，不断发展、完善，而且将借二象性为基础，使不同的理论和方法相互沟通。

作者希望最弱受约束电子理论带来新的信息，能为量子理论的发展和应用做出一些贡献。

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 内容概要

最弱受约束电子理论(WBE Theory)是作者提出并建立起来的一种新的量子理论。目前,该理论已用于原子性质的计算和指导配位聚合物的分子设计,初步展现了该理论的应用前景。

全书以最弱受约束电子理论及应用为内容,分四章叙述。

第1章介绍和理论有关的量子力学基础知识,后三章围绕理论及应用展开。

本专著对物理、化学和材料科学的研究人员和大学教师有参考价值。书中新颖的学术思想也有可能引起博、硕、本科生和相关人员的兴趣。

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 作者简介

郑能武，男，1939年11月生，福建省武夷山市（原崇安县）人，1957年崇安一中毕业后考入北京大学化学系，1963年毕业（学制六年），中国科学技术大学教授、博士生导师，享受国务院政府特殊津贴，主要从事理论无机化学和配位聚合物化学领域的研究工作，在国际上首次提出最弱受约束电子理论，撰写了两部专著并在国际著名杂志上发表了数十篇研究论文，受到国内外同行的关注，主讲过《高等无机化学》、《无机化学》课程，和他人合作出版过5部教材和教学参考书，出版科普著作4部，曾作为访问教授出访美国普渡（Purdue）大学，1993—1996年任中国科学技术大学应用化学系系主任、校学术委员会委员、校学位委员会委员，曾任马来西亚化学杂志国际顾问委员会委员（Malaysian J, chem, , Member of International Academic Board）、南开大学化学系兼职教授、安徽农业大学兼职教授，指导过的博、硕士生中有2人获中国科学院院长奖，所教学生遍及海内外。

## &lt;&lt;最弱受约束电子理论及应用&gt;&gt;

## 书籍目录

前言第1章 最弱受约束电子理论的量子力学基础- 1.1 波粒二象性 1.2 测不准原理 1.3 薛定谔方程 1.4 电子自旋和自旋轨道 1.5 微观全同粒子的不可分辨性 1.6 泡利原理和周期表 1.7 量子力学中的近似方法之一——变分法 参考文献第2章 最弱受约束电子理论(一) 2.1 最弱受约束电子概念 2.2 电离过程和类似奥夫保过程互为逆过程 2.3 最弱受约束电子的单电子哈密顿算符 2.3.1 最弱受约束电子的非相对论单电子哈密顿算符 2.3.2 电子间磁相互作用的处理 2.3.3 相对论哈密顿算符 2.4 最弱受约束电子的单电子薛定谔方程 2.5 最弱受约束电子理论的要点 参考文献第3章 最弱受约束电子理论(二) 3.1 势函数 3.2 径向方程的求解 3.2.1 球谐函数 3.2.2 广义拉盖尔函数方法 3.2.3 还原成氢和类氢的形式 3.2.4 广义拉盖尔函数的定义和性质 3.2.5 关于满足赫尔曼—费曼定理的证明 3.3 任意幂次径向坐标算符 $r^k$ 的矩阵元和平均值 3.4 WBEPM理论中散射态的精确解 3.5 精细结构的计算式 3.6 旋—轨耦合系数的计算 3.7 关联最弱受约束电子势模型理论和斯莱特原子轨函 参考文献第4章 理论的应用 4.1 电离能 4.1.1 引言 4.1.2 等光谱态能级系列及系列中电离能的差分定律 4.1.3 电离能的计算 4.1.4 镧系离子的4fn电子的逐级电离能 参考文献 4.2 能级 4.2.1 引言 4.2.2 能级计算公式 4.2.3 确定参数的方法 4.2.4 示例 .....代表性论著后记

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 章节摘录

插图：先简要地重述一下所谓的奥夫保过程。

为了描述周期表中各种元素的电子结构的系统变化，化学家们提出了所谓的奥夫保过程（Aufbau process），按原子序数的变化逐个构造周期表中各种元素的电子结构。

所谓奥夫保过程就是从氢原子开始，每次把一个质子和一个电子分别加到核和核外适当的电子亚层的轨道中，直到构造出所有元素的正确的电子组态。

具体地说，氢原子是由一个带单位正电荷的质子的原子核和一个处于最低能态的1s轨道上的核外电子组成。

氢原子的电子组态是1s<sup>1</sup>。

如果把一个质子和一个电子分别加到氢原子核和核外最低能态的1s轨道上，便可构造出周期表中具有1s<sup>2</sup>电子组态的第二号元素氦。

若再把一个质子和一个电子分别加到氦核和核外最低能态的空的2s轨道上，便可构造出周期表中具有电子组态1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup>的第三号元素锂原子。

如此继续下去，遵照最低能量原理和泡利（Pauli）不相容原理，便可造成周期表中所有元素的电子组态。

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 后记

多年来我一直致力于在波粒二象性统一的基础上建立一种新的量子理论，最弱受约束电子理论就是这种想法的尝试，现在既然已经在原来没有路的地方踩出了一些路的印迹，我希望今后走的人多了会成为一条路。

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 编辑推荐

《最弱受约束电子理论及应用》由中国科学技术大学出版社出版。



<<最弱受约束电子理论及应用>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>