

<<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：9787312025594

10位ISBN编号：7312025595

出版时间：2011-12

出版时间：郑能武 中国科学技术大学出版社 (2011-12出版)

作者：郑能武

页数：241

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>>

### 内容概要

郑能武编写的《最弱受约束电子理论及应用（修订版）》主要讨论原子问题。

全书共分四章。

第1章简要介绍了和理论有关的量子力学基础知识；第2章是最弱受约束电子理论的基本要点的阐述；第3章讨论了最弱受约束电子理论在原子体系中的解析表达形式；第4章花费很大篇幅讨论了最弱受约束电子理论在化学、物理学领域中的应用，包括电离能、能级、跃迁、总电子能量、电负性标度、配位聚合物的分子设计等目前涉及的几个主要应用方面。

所有计算都坚持理论的统一性、普遍性、简便性和准确性四项原则。

## <<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 Advisory 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 $r^k$ 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 参考文献 4.3 振子强度、跃迁概率和辐射寿命的计算 4.3.1 引言 4.3.2 计算原理和方法 4.3.3 示例 参考文献 4.4 总电子能量的计算 4.4.1 用电离能计算体系的总电子能量 4.4.2 最弱受约束电子势模型理论下基态He系列的变分处理 4.4.3 最弱受约束电子势模型理论下基态He系列的微扰处理 参考文献 4.5 电负性、硬软酸碱和配位聚合物的分子设计 4.5.1 电负性概念和标度 4.5.2 最弱受约束电子的核势标度 4.5.3 硬软酸碱概念和标度 4.5.4 配位聚合物的分子设计 参考文献代表性论著后记

## <<最弱受约束电子理论及应用>>

### 编辑推荐

郑能武编写的《最弱受约束电子理论及应用(修订版)》主要讨论原子问题。

全书共分四章。

第1章简要介绍了和理论有关的量子力学基础知识；第2章是最弱受约束电子理论的基本要点的阐述；第3章讨论了最弱受约束电子理论在原子体系中的解析表达形式；第4章花费很大篇幅讨论了最弱受约束电子理论在化学、物理学领域中的应用，包括电离能、能级、跃迁、总电子能量、电负性标度、配位聚合物的分子设计等目前涉及的几个主要应用方面。

所有计算都坚持理论的统一性、普遍性、简便性和准确性四项原则。

<<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>