

<<量子化学中的场论方法>>

图书基本信息

书名：<<量子化学中的场论方法>>

13位ISBN编号：9787560250724

10位ISBN编号：7560250726

出版时间：2007-10-01

出版时间：吉林东北师范大学

作者：赵成大[著]

页数：298

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>

## <<量子化学中的场论方法>>

### 内容概要

《量子化学中的场论方法》是为量子化学专业研究生，年青的理论化学、化学物理学工作者们提供的一部学习量子场论方法在化学多体问题中应用的初级读物。

我初次接触量子场论是在上世纪60年代的吉林大学物质结构学术研讨班上，当时唐敖庆老师邀请周孝谦与吴式枢两位教授为该班讲授多体理论与量子场论方法的专题。

听时对所谈的内容细节虽然不甚懂，但是其对于物理以及化学科学的重要性给我留下颇深的印象。在研讨班的三年时间里，唐敖庆老师曾多次指出量子化学的发展应当注意吸取固体物理中多体理论（包括量子场论）方法的运用，这些教诲加强了我对这些方面的关注。

## <<量子化学中的场论方法>>

### 作者简介

赵成大，1927年生，吉林省怀德县人。  
物理化学教授，从事本科与研究生的教学与科研工作五十余年。  
在分子结构，化学反应理论与非金属材料的结构与性能关系等方面在国内外专业学术杂志上发表论文百余篇（其中两项曾获得国家教委科技进步奖）；已出版的教材与专著有《物质结构》、《新编物理化学》、《统计热力学导论》、《化学反应量子理论》、《理论无机化学与固体量子化学》等十部（含第二版），其中多部获得全国优秀教材奖与学术专著奖。

## &lt;&lt;量子化学中的场论方法&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 多体问题1-1 问题的性质1-2 全同粒子系1-3 多电子波函数1. 多粒子系Hamilton(汉密尔顿)量及Schrodinger方程式2. Pauli不相容原理与多电子波函数3. 电子基态与激发态波函数4. 精确波函数与组态作用1-4多电子系矩阵元的计算1. 矩阵元 (K|O|L) 的计算2. 矩阵元计算的一般规则3. 矩阵元规则的导出4. 自旋轨道向空间轨道的变换5. 自旋适合的组态(Spin - adapted Configurations)1-5 Hartree - Fock近似1. 泛函变分2. 单行列式函数能量的极小化3: 正则Hartree - Fock方程式(The canonical Hartree - Fock eq.)4. Hartree - Fock方程及其解的意义1-6 Roothaan方程式1. 闭壳层Hartree - Fock:限制的自旋轨道2. 基函数的引入与Roothaan方程式3. Roothaan方程式的SCF法求解4. 期望值与布居分析1-7非限制开壳层Hartree - Fock方程1. 开壳层Hartree - Fock与非限制自旋轨道2. 基函数的导入与Pople - Nesbet方程式3. 非限制的SCF方程式的解第二章二次量子化方法--基本概念与原理2-1二次量子化的重要性2-2产生算符与湮灭算符1. 真空态2. 产生算符3. 粒子数表象4. 湮灭算符5. 产生算符与湮灭算符间的交换关系6. 单粒子态的正交性规则--共轭关系7. 产生算符与湮灭算符性质的总结2-3粒子数算符2-4量子力学算符的二次量子化表示1. 概述2. 单电子算符3. 双电子算符4. Born - Oppenheimer近似Hamilton量的二次量子化形式5. 二次量子化算符的Hermite性质第三章 二次量子化方法的应用(1)3-1矩阵元的求值1. 基本矩阵元2. Fermi真空概念.....第四章 二次量子化方法的应用(2)第五章 Green函数法基础第六章 Green函数法与量子化学第七章 再谈Green函数主要参考书目

<<量子化学中的场论方法>>

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>