第一图书网, tushu007.com

<<量子化学>>

图书基本信息

书名：<<量子化学>>

13位ISBN编号：9787030192134

10位ISBN编号：7030192133

出版时间：2007

出版时间：科学出版社

作者：徐光宪,黎乐民,王德民

页数：450

字数：551000

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

第一图书网, tushu007.com

内容概要

本书分为上、中、下三册。
上册讲述量子力学的基本原理、处理问题的基本方法和数学工具以及最重要的普遍性结论，中册介绍重要的量子化学计算方法，下册介绍量子化学研究的高级理论方法。
本书是上册，共有8章，第1章简述量子力学基本原理，第2、3章介绍简单体系的精确求解方法和结果，第4章讨论轨道和自旋角动量，第5章介绍量子力学处理问题最常用的数学方法——变分法和微扰理论，第6、7章介绍群论基础知识和群表示理论，第8章简述群论在量子化学中的应用。
此外，为方便读者，附录1简要介绍了有关矩阵的基本知识；附录2给出分子对称性群不可约表示的特征标表。

本书可作为量子化学专业研究生教材或者教学参考书，也可供对量子化学基础知识要求比较高的大学高年级学生以及相关专业的教师和科研人员学习参考。

第一图书网, tushu007.com

书籍目录

第二版序
第一版序
第1章 量子力学基础
第2章 简单体系的精确解
第3章 氢原子和类氢离子
第4章 角动量和自旋
第5章 变分法和微扰理论
第6章 群论基础知识
第7章 群表示理论
第8章 量子化学中的应用
附录1 矩阵及其运算
附录2 特征标表

章节摘录

版权页： 插图： 6.1群的定义和实例 群论是代数学的一个分支，已有一百多年的历史，量子力学理论差不多从一开始就应用了群论的研究成果，现在群论在物理学和化学中已成为一种不可缺少的数学工具。
代数学上的群论研究的是有限或无限集合中定义的特定代数运算的性质，在物理学和化学中，群论的应用则是与对称性紧密联系起来的。
群论被用作沟通体系存在的对称性与其必然会具有的一些性质的桥梁，具体地说，我们用群论来帮助弄清楚，由于研究对象中存在这样或那样的对称性，体系将必然具有些什么性质。
对于多电子体系（原子、分子、晶体），求出Schrodinger方程的具体解很困难；即使用数值方法求出它的解，得到能级的分布情况、波函数的具体数值等，也还没有把一些本质的问题揭示出来。
例如能级的分布情况，哪些是由体系势能函数的具体形式决定的，哪些只由体系的对称性质决定，并不清楚；如果体系的对称性保持不变，只是势能函数的具体形式改变了，波函数将如何改变等规律性的结论也得不出来。
而利用群论这一数学工具，只要知道所研究的体系具有哪些对称性质，可以不进行与体系的其他具体细节有关的计算，就能得出关于它的性质的许多结论，而且这些结论只与体系的对称性质有关，与体系的其他特殊性无关，因此具有普遍的意义。
从群论原理导出量子力学中的许多守恒定律和光谱选律，就是这样的例子，当要对体系的性质进行定量计算时，利用群论也可以使计算工作量大为减少。
6.1.1 群的定义 设有一组元素的集合G{a，6，c，…}，其中定义有称之为“乘法”的代数运算，给出由任意两个元素按一定次序结合（相乘）得到确定的一个元素（乘积）的规则；如果以下条件得到满足：（1）具有封闭性，任意两个元素的乘积都是集合中的一个元素，例如，若a和b是集合中的元素，则（ab）和（ba）也是集合中的元素，但（a6）可能不等于（ba），即乘法不一定满足交换律，因此要区分用一个元素从左边乘（左乘）或从右边乘（右乘）另一个元素。

编辑推荐

《21世纪高等院校教材:量子化学:基本原理和从头计算法(上册)(第2版)》可作为量子化学专业研究生教材或者教学参考书，也可供对量子化学基础知识要求比较高的大学高年级学生以及相关专业的教师和科研人员学习参考。

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