

<<固体量子化学>>

图书基本信息

书名：<<固体量子化学>>

13位ISBN编号：9787040119671

10位ISBN编号：7040119676

出版时间：2003-8

出版时间：北京蓝色畅想图书发行有限公司（原高等教育出版社）

作者：赵成大

页数：458

字数：500000

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>

## &lt;&lt;固体量子化学&gt;&gt;

## 前言

本书第一版完稿于1993年冬，于1997年出版。近年来已被许多高校（研究所）有关材料科学专业作为大学参考书或研究生教材使用，据说反应尚好。

由于该书印数较少，初版书上市很快就已售空。

所以近几年笔者不断地收到一些教师与同学们（包括国外留学人员）需求该书的来信与电传。

笔者除了已将自存的几十本书寄赠完之外别无他法了。

这次本书被教育部审定作为研究生教材得以再版，实在是适应了当前这方面需求的大好事，同时借此机会笔者对本书得以作一次全面的校订与增补。

使得它更能适应材料科学的发展实际与国内有关专业教学的需要。

全书共十章，总的来说，作为研究生教材，除了增补了近十年的重要文献外，本书的基本架构没有变。

其中第一章晶体结构与第二章固体能带理论基础部分仍然是适合化学与其他非物理专业的学生们学习掌握凝聚态物理基本概念与方法所必需的。

第三章与第四章是固体量子化学的理论模型与方法，乃本书的理论基础的核心部分，鉴于其中的密度泛函理论方法在固体材料研究中的应用更加广泛深入，因而增补了一节（§ 4-6 一些具体计算方案），反映了当前新材料的分子设计与材料设计中理论工具应用的现况，其余均仍属必要的。

在第五章到第十章的新材料各论部分中，仅对第八章有机磁性体增补一节（§ 8-5 多自由基分子的磁性与相变温度），第九章有机非线性光学材料中增补二节（§ 9-6 螺旋共轭分子与 § 9-7 C60衍生物的NLo性质），最后在第十章中增补一节（§ 10-5 碳纳米管的结构、电子态与性能）反映了当今材料科学领域中重大而颇有发展前景的课题的研究现状。

关于纳米材料，似乎应当单辟一章专门给予介绍与论述，但限于这次修订时间短促，只将有关材料作为一节补充在超导电材料之后。

经这次修订增补之后，自信再版会比初版更能反映当前材料科学的分子设计理论现况，更能让学生易于理解与掌握。

虽然笔者已奋力为之，但限于水平与条件，不当之处一定不少，恳切希望读者与同仁多加指正。

## <<固体量子化学>>

### 内容概要

本书是教育部研究生工作办公室推荐教材。

本书在简要讨论晶体对称性与能带理论的基础上，重点介绍固体研究中的理论模型与量子化学方法及其在固体材料领域中的应用。

全书共10章。

内容涉及近年来开发的新型材料，如低维固体、有机导体、磁性体、非线性光学材料、高温超导体与有机超导体及碳纳米材料的结构、电子态与性能关系研究的现状。

本书可作为高等学校化学、物理、冶金、化工与材料科学等专业的本科高年级学生、研究生教材，也可供科技工作者及教师参考。

## &lt;&lt;固体量子化学&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 晶体的周期性结构与对称性 1-1 晶体的空间对称性 1. 平移对称性 2. 点对称性 3. 晶系与Bravais晶格 1-2 倒晶格与Brillouin区 1. 正格矢空间中的晶胞 2. Wigner-Seitz元胞 3. 倒格矢 4. Brillouin区 1-3 平移群的不可约表示 1-4 空间群的不可约表示 1. 波矢k群及其表示 2. 空间群的不可约表示 1-5 双值空间群 1-6 时间反演与磁性空间群 1. 时间反演算符 2. Kramers定理与附加简并度 3. 磁性空间群 1-7 晶体对称性与相变 参考文献第二章 能带论基础 绪论 2-1 晶体中电子态 1. Schrodinger方程的对称性与能带 2. Bloch函数的一般性质 2-2 Brillouin区中对称点上态的分类 1. 简单立方点阵 2. 相容性关系 2-3 自由电子能带 1. 自由电子模型 2. 简单立方晶体 3. 准自由电子近似 2-4 紧束缚近似 1. 忽略重叠积分的情形 2. 基于S, P态的能带 3. 重叠积分不为零的情形 2-5 正交化平面波法与赝势法 1. 正交化平面波法 2. 赝势法 2-6 元胞法、缀加平面波法与KKR法 1. 元胞法 2. 缀加平面波法 3. KKR法 参考文献第三章 晶体的分子模型 绪论 3-1 分子簇模型 3-2 簇在晶体中的环境 3-3 扩展晶胞的准分子模型 1. 扩展晶胞及其对称性 2. 倒格矢空间中的扩展晶胞与Brillouin区 3. 扩展晶胞的准分子模型 参考文献第四章 固体研究中的量子化学方法 绪论 4-1 电子态计算中的基本近似 1. 非相对论的分子Hamilton量 2. Born-Oppenheimer近似 3. 轨道近似 4-2 分子理论中的自洽场方法 1. 闭壳层体系的Harrree-Fock-Roothaan方法 2. 开壳层体系的Hanree-Fock-Roothaan方法 3. Mulliken-Ruedenber9近似与ZD0近似 4-3 固体研究中的LCAO-C0近似 1. 原子轨道线性组合的晶体轨道法要点 2. 分子模型中的LCAO近似 3. 准分子扩展晶格模型中的Mulliken近似与零微分重叠近似 4-4 固体研究中的Xa - 方法 1. 定域化电子密度近似--Hartree-Foek-Slater方程式 2. 多重散射波Xa-方法 .....第五章 低维固体第六章 真实晶体第七章 晶体表面与晶体缺陷第八章 有机磁性体第九章 有机非线性光学材料第十章 超导电材料与碳纳米材料附录索引

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>