第一图书网, tushu007.com

<<电子结构>>

图书基本信息

书名：<<电子结构>>

13位ISBN编号：9787506282925

10位ISBN编号：7506282925

出版时间：1970-1

出版时间：北京世界图书出版公司

作者：Richard M.Martin

页数：624

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

内容概要

《电子结构》是一部教科书，内容分为五个部分。
第一部分介绍相关理论知识，重点讨论周期结构和能带论等。
第二部分介绍密度泛函理论，重点讨论Kohn-Sham方法。
第三部分介绍原子的重要预备知识，包括原子的电子结构和赝势。
第四部分介绍确定电子结构的三个基本方法：平面波和网格方法，局域化轨道方法和缀加函数方法。
第五部分介绍从电子结构确定材料性质的一些新进展，包括量子分子动力学、响应函数、极化和局域化、以及建议进一步阅读的参考资料。
非常详细的附录提供阅读《电子结构》所需要的全部背景知识。
《电子结构》特色：（1）前后章节衔接较好，知识要点系统连贯，选题先进。
（2）行文重在讲解基本原理和计算方法，略去具体的数学推导过程，脉络连贯，简洁明晰。
附录（共有15个）提供了所有背景知识和数学推导，供读者参考。
（3）重要思想和结论在每章开始就明确地点出，之后按逻辑顺序做进一步阐述。
（4）目前已有很多关于电子结构的理论、模型和处理方法，作者对这些理论和方法进行了综合比较和评价。
注：《电子结构》为英文版。

作者简介

Richard M. Martin，1969年在美国芝加哥大学物理系取得博士学位。
先后在贝尔实验室、Xerox Palo Alto研究中心与斯坦福大学从事科学研究工作。
1988年加入到伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，现任该校物理系教授，美国物理学会高级会员，美国科学促进会会员。
发展了新的计算方法并在复杂材料的电子结构等领域做出了杰出贡献。

书籍目录

PrefaceAcknowledgmentsNotationPart I Overview and background topics1 Introduction2 Overview3 Theoretical background4 Periodic solids and electron bands5 Uniform electron gas and simple metalsPart II Density functional theory6 Density functional theory: foundations7 The Kohn-Sham ansatz8 Functionals for exchange and correlation9 Solving Kohn-Sham equationsPart III Important preliminaries on atoms10 Electronic structure of atoms11 PseudopotentialsPart IV Determination of electronic structure:the three basic methods12 Plane waves and grids:basics13 Plane waves and grids:full calculations……Part IV Determination of electronic structure:the three basic methodsPart V Predicting properties of matter from electronic structure-recent cevelopmentsAppendixReferencesIndex

编辑推荐

目前，材料电子结构研究已成为现代凝聚态物理学中一个重要分支。
材料的许多物理性质可以直接从量子力学的基本方程出发进行定量计算，使得物理、化学和材料科学中的很多问题焕发出新的生机。
《电子结构》是为学习或从事第一性原理计算的学生和科研人员编写的参考书。
作者结合实用计算方法和实际应用，深入讲解了材料电子结构的基本理论框架及其计算方法，阐明了通过电子结构计算确定材料重要物理性质的具体过程。
值得一提的是，作者还在书中评论了现有计算方法的潜力、局限性以及需要解决的挑战性问题。

第一图书网, tushu007.com

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