

<<相对论量子化学>>

图书基本信息

书名：<<相对论量子化学>>

13位ISBN编号：9787030379597

10位ISBN编号：7030379594

出版时间：2013-6

出版时间：科学出版社

作者：曹晓燕,方维海, (德国) M.多尔格 (Dolg M.)

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>

<<相对论量子化学>>

内容概要

本书主要介绍相对论量子化学的理论基础及计算方法。

理论基础包括爱因斯坦的狭义相对论、相对论波动方程，即Klein-Gordon方程和Dirac方程、相对论的对称群--二倍群、相对论的电子-电子相互作用等。

计算方法包括全电子法和价电子法。

在全电子法中，除四分量方法外，将重点介绍以个几个二分量近似哈密顿，即：Douglas-Kroll-Hess (DKH) 哈密顿、Wood-Boring (WB) 哈密顿 (或称Cowan-Griffin哈密顿)、Chang-Pelissier-Durand 哈密顿 (或称zeroth-orderregularapproximationZORA哈密顿)、Pauli哈密顿等。

书中将告诉读者如何得到以上近似哈密顿，并分析他们的优缺点。

<<相对论量子化学>>

书籍目录

序

前言

第1章狭义相对论基础

1.1 19世纪末的物理学研究

1.2 间隔不变性

1.3 Lorentz变换

1.4 速度变换

1.5 质量变换

1.6 相对论能量

1.7 相对论动量

参考文献

第2章相对论波动方程

2.1 自由粒子的Klein—Gordon方程

2.1.1 Klein—Gordon方程的非相对论极限

2.1.2 几率密度和几率流密度

2.2 Dirac方程

2.2.1 自由粒子的Dirac方程

2.2.2 几率密度和几率流密度

2.2.3 电磁场中单粒子的Dirac方程

2.2.4 Dirac方程的非相对论极限

2.3 Dirac方程的两个严格解

2.3.1 自由电子

2.3.2 氢原子

2.3.3 径向方程的解

2.4 有限核电荷密度分布模型

参考文献

第3章相对论的电磁相互作用

3.1 Maxwell方程组

3.2 电磁场的矢势和标势及规范变换

3.3 运动电荷产生的电磁场

3.4 运动电子在电磁场中的相对论势能

3.5 运动电荷间相互作用的相对论形式

参考文献

第4章相对论的对称性原理

4.1 空间对称变换

4.2 相对论的单电子原子的对称性

4.2.1 量子态的转动

4.2.2 单电子原子的 360° 转动

4.3 分子对称群：二倍群

4.4 位形空间中的转动和 $SO(3)$ 群

4.5 自旋空间中的转动和 $SU(2)$ 群

4.5.1 自旋态和自旋算符的表示

4.5.2 自旋空间中的转动

4.6 Dirac方程的转动变换

4.7 空间反演

<<相对论量子化学>>

4.8反映和旋转反映

4.9时间反演

4.10 Lorentz变换和Lorentz群

参考文献

第5章全电子算法

5.1四分量方法

5.1.1 Hartree—Fock方法

5.1.2 电子相关能计算

5.1.3 密度泛函理论

5.2二分量方法

5.2.1 自旋分离

5.2.2 Foldy—Wouthuysen变换

5.2.3 Douglas—Kroll—Hess Hamilton算符

5.2.4 Wood—Boring Hamilton算符

5.2.5 零级规则近似 Hamilton算符

5.2.6 精确的二分量方法

参考文献

第6章有效核实势法

6.1 Phillips—Kleinman方程

6.2 广义的Phillips—Kleinman方程

6.3 原子的价电子模型 Hamilton算符

6.4 分子的价电子模型 Hamilton算符

6.5 非相对论赝势的解析式

6.6 相对论赝势的解析式

6.7 核实极化势

6.8 核实—核实(核)排斥势

6.9 赝势的优化

6.9.1 能量一致的从头算赝势

6.9.2 形状一致的从头算赝势

6.9.3 广义的相对论的有效核实势

6.10 价电子基组

6.11 模型势方法

6.11.1 Huzinaga—Cantu方程

6.11.2 多电子体系的价电子模 Hamilton算符

6.11.3 从头算模型势

6.12 有效核实势与严格的相对论 Hamilton算符

6.13 基于密度泛函理论的有效核实势

6.13.1 模型势

6.13.2 形状一致的赝势

参考文献

第7章元素周期表中的相对论效应

7.1 主族元素

7.2 过渡金属元素

7.3 镧系和锕系元素

7.4 超重元素

参考文献

附录A 算符代数

<<相对论量子化学>>

附录B矢量分析

B.1 矢量关系

B.2 Nabla, 算符

B.3 散度、旋度和梯度

附录C原子单位制

附录DQED效应

附录EHylleraas—Undheim—MacDonald定理

E.1 线性变分法

E.2 Hylleraas—Undheim—MacDonald定理的推导

附录FLagrange方法

附录G动表象

G.1 态函数

G.2 算符

索引

<<相对论量子化学>>

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>