

# 《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：2007-5

出版社：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以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《电子结构》

## 内容概要

电子结构，ISBN：9787506282925，作者：（美）Richard M.Martin

# 《电子结构》

## 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。

# 《电子结构》

## 书籍目录

Preface Acknowledgments Notation Part I Overview and background topics 1 Introduction 2 Overview 3 Theoretical background 4 Periodic solids and electron bands 5 Uniform electron gas and simple metals Part II Density functional theory 6 Density functional theory: foundations 7 The Kohn-Sham ansatz 8 Functionals for exchange and correlation 9 Solving Kohn-Sham equations Part III Important preliminaries on atoms 10 Electronic structure of atoms 11 Pseudopotentials Part IV Determination of electronic structure: the three basic methods 12 Plane waves and grids: basics 13 Plane waves and grids: full calculations. . . . . Part IV Determination of electronic structure: the three basic methods Part V Predicting properties of matter from electronic structure- recent developments Appendix References Index

# 《电子结构》

## 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。

## 精彩短评

- 1、书写的好，肯定能看懂，不但从数学上有完整描述，而且在文字解释上也很下功夫，看一遍基本有一个整体的认识。此外还附带一个非常好的密度泛函计算程序，可以跟踪着读，对我非常有帮助
- 2、影印版几乎和原书一样，但是价格相对便宜很多。内容非常好，老板力荐，计算材料学搞第一原理计算的入门教材，难度循序渐进，深入浅出，实为不可多得的好书。
- 3、读来流畅，牛X写书果然不错
- 4、电子结构很适合学物理的人看，如果书页的质量再厚实一些就perfect了
- 5、很好的一本书，内容详细。
- 6、很经典的一本书，计算材料学必看
- 7、因为其内容非常的充实，而且讲解细致，对于想要深入了解第一性原理计算的同学是非常重要的。我是做第一性的，感觉有了这本书后，如获至宝，非常的喜欢，尽管还需要慢慢的去啃，但是我真的很喜欢这本书！如果你只是想用一些商业软件去得到一些结果的话，那就不用去看这本书了。
- 8、刚买到，随便翻了一翻，就发现很多页面看起晃眼，影印质量差；内容上还不错，值得学习。
- 9、对于从事凝聚态物理，尤其是晶态固体物理理论学习的人来说是非常好的材料。本书对于固体能带理论的各种模型的讨论很详尽，比较适合具有一定固体物理基础的人来自学。
- 10、内容经典！科研必备！服务不错，开始发的书有问题，好多页看不清！后来换了一本，发货很快，服务很好！
- 11、不错，给同学买的，买来参考用
- 12、经典教材，质量不错，能用
- 13、书内容不错，亚马逊配送也快，就是折扣少了点，感觉有点贵，而且纸张有点薄
- 14、书还不错，挺好的送货快，也可以货到付款，不错
- 15、印刷质量不好，但不怪当当
- 16、帮男朋友买的书 他说挺好的~
- 17、老师指定要看的书。书讲的很详细也很全面，非常适合做第一性原理的同学。
- 18、印刷很好，不错！理论计算必读的经典著作
- 19、书的内容很好，可惜被世图影印的还没有盗版的纸张好
- 20、这本书应该是凝聚态物理的入门书了
- 21、书很好。只是太高深，需要一定的物理基础。

# 《电子结构》

## 精彩书评

- 1、对于做第一性原来的人来说，这本书作为入门还是不错的。内容很广泛，但不够深入，基本上对目前的电子结构理论作了一个大的总结。也很适合闲来无事随手翻阅。
- 2、从题目上来看，Richard Martin老先生力求给出电子结构计算领域的全貌，这点在参考文献的体例，和推荐读物，以及附录里体现的尤其明显。但是很明显，固体物理或者整个凝聚态领域是一个大杂烩，旁支繁杂，却无甚中心思想。定量地理解材料物性是电子结构计算的主要目的，而同样相应的理论和算法也繁杂异常。对于常用黑箱计算软件包，不管是vasp, quantum espresso 还是abinit, 甚至castep/dmol3等模块，参考本书至少可以得窥全貌，而不至于用了软件而不知道电子结构是何物。或许，这就是Martin教授此书的目的？更深入理解，则需要阅读对应的文献，或者花上多年功夫在某专门领域探讨一翻了。

## 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:[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)