

<<统计力学>>

图书基本信息

书名：<<统计力学>>

13位ISBN编号：9787030342249

10位ISBN编号：7030342240

出版时间：2012-5

出版时间：科学出版社

作者：陈敏伯

页数：502

字数：693000

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>

<<统计力学>>

内容概要

统计力学：理论化学用书是为理论化学、物理化学专业的教师、科研人员、研究生，或者想要熟悉理论的实验物理化学家们，包括对分子模拟、材料模拟中的统计力学原理感兴趣的读者写的统计力学。

众所周知，统计力学与量子力学构成了整个物质理论的两大部分，因此也是理论化学的两大部分。

统计力学：理论化学用书在比较严格的理论框架下，系统介绍统计力学。

全书共16章，内容涵盖经典动力学、量子动力学、系综原理、系综原理在若干化学问题上的应用、相关函数、连续介质力学、非平衡热力学、涨落理论、概率论方法、动理学描述与Boltzmann方程、Brown运动、Langevin方程及Fokker-Planck方程、线性响应理论、Zwanzig-Mori投影算符理论、密度泛函理论。

并且书后备有附录介绍多个数学工具，以方便阅读。

统计力学：理论化学用书可作为高等院校、研究所化学、物理、材料科学、生命科学等有关专业领域教师、科研人员的参考书和研究生教材。

<<统计力学>>

书籍目录

序前言第1章 引言1.1 宏观量的统计性质1.2 基本概念1.3 统计力学中体系力学描述的三种不同层次参考文献第2章 经典动力学2.1 Lagrange函数2.2 最小作用量原理和Lagrange方程2.3 Hamilton正则方程2.4 最小作用量原理与Hamilton正则方程2.5 概率分布函数、Liouville方程2.5.1 经典力学中的纯态与混合态2.5.2 系综、系综平均2.5.3 概率分布函数2.5.4 Liouville方程2.6 经典Liouville算符、力学量的时间演化2.7 经典演化算符、时间反演对称性2.8 约化分布函数2.9 全同粒子体系力学量的平均值2.10 Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon级联方程参考文献第3章 平衡态系综原理3.1 微正则系综3.1.1 等概率原理和微正则系综3.1.2 Poincaré 回归定理3.1.3 等概率原理和最大熵原理3.2 正则系综3.2.1 正则系综的最可几分布3.2.2 正则系综中的热力学关系3.3 巨正则系综3.3.1 单组分GCE的最可几分布3.3.2 多组分GCE的最可几分布3.3.3 多组分巨正则系综与热力学的关系3.3.4 Lagrange待定乘子 λ 的确定3.3.5 Lagrange待定乘子 μ 的确定3.3.6 巨正则系综的公式小结3.4 等温等压系综3.4.1 体系的配分函数3.4.2 常数 β 的确定3.4.3 等温等压系综的热力学关系3.5 平衡态系综理论的小结参考文献第4章 近独立子体系的统计热力学4.1 独立子体系和近独立子体系4.2 粒子的配分函数4.2.1 分子骨架的运动状态、简单体系的量子力学解4.2.2 分子配分函数的析因子性4.2.3 粒子平动、振动、转动的配分函数4.2.4 Bose子、Fermi子和Boltzmann子4.3 配分函数的经典表述4.3.1 三维平动子配分函数的经典表述4.3.2 刚性转子配分函数的经典表述4.3.3 一维简谐振子配分函数的经典表述4.4 平动子体系的分布函数4.5 理想气体的热力学量4.6 晶体的定容热容、Einstein与Debye模型4.6.1 单原子晶体的Einstein模型4.6.2 晶体热容的Debye模型4.6.3 热力学第三定律的统计力学基础4.7 双原子分子的运动成分及其对称性4.8 能量均分定律、双原子分子气体的热容4.9 多原子分子的运动和配分函数4.9.1 多原子分子的简正振动4.9.2 多原子分子的转动惯量4.9.3 多原子分子的能量4.9.4 多原子分子的配分函数4.9.5 s 个简谐振子组成的独立子体系4.10 多原子分子气体的分布函数4.11 化学平衡的统计理论4.11.1 低压气相化学反应4.11.2 气-固相的升华平衡4.12 反应速度理论中的统计理论4.12.1 Eyring的过渡态理论4.12.2 RRK理论4.12.3 RRKM理论参考文献第5章 平衡态系综原理在化学中的应用5.1 固体的状态方程5.2 外磁场中的气体5.3 气固吸附5.3.1 气固单分子层吸附5.3.2 气固多分子层吸附5.4 吸附竞争5.5 非理想气体5.5.1 非理想气体的virial展开5.5.2 van der Waals气体的virial展开5.5.3 非理想气体的巨正则系综理论5.5.4 集团展开参考文献第6章 相关函数6.1 空间相关函数6.1.1 位置的概率密度、动量的概率密度6.1.2 数密度及其涨落的空间相关函数6.2 正则系综中的空间相关函数6.2.1 约化分布函数6.2.2 径向分布函数6.2.3 直接相关函数和Ornstein-Zernike方程6.3 时间相关函数6.3.1 非平衡定态时的时间相关函数6.3.2 平衡态时间自相关函数的性质6.3.3 时间相关函数的应用参考文献第7章 量子动力学7.1 Hilbert空间中的量子动力学7.1.1 含时与不含时的Hamilton量7.1.2 纯态及其时间演化7.1.3 混合态、密度算符及其时间演化7.1.4 熵算符7.1.5 约化密度算符7.2 Liouville空间中的量子动力学7.2.1 量子Liouville算符7.2.2 二能级体系、Liouville空间7.2.3 Liouville空间中的时间演化7.3 有限温度时的量子统计力学7.3.1 正则系综7.3.2 正则系综的Helmholtz自由能极小原理7.3.3 巨正则系综7.3.4 巨正则系综的巨势极小原理参考文献第8章 连续介质力学8.1 基本概念8.1.1 压强张量和应力张量8.1.2 应变张量8.1.3 广义Hooke定律8.1.4 形变能8.1.5 各向同性介质的形变能8.1.6 各向同性介质的应力张量8.2 流体力学8.2.1 流体的运动方程8.2.2 Helmholtz速度分解定理8.2.3 实际黏性流体的黏度8.2.4 不可压缩流体的运动方程——Cauchy方程8.2.5 Stokes流体8.2.6 Navier-Stokes方程8.2.7 能量耗散率8.2.8 Stokes公式8.2.9 黏性流体的流动8.2.10 毛细管内黏性流体的流动、Poiseuille公式8.2.11 流体力学小结8.3 连续介质的导热8.3.1 Fourier导热定律8.3.2 静止连续介质的导热参考文献第9章 非平衡热力学基础9.1 局域平衡近似9.2 不可逆过程中的平衡方程9.2.1 连续介质中的质量平衡9.2.2 连续介质中的动量平衡9.2.3 连续介质中的能量守恒9.2.4 局域熵、不可逆过程的熵产生率9.3 Onsager关系9.4 熵产生极小定理参考文献第10章 涨落理论10.1 涨落的基本概念10.2 涨落的系综理论10.2.1 正则系综中的涨落10.2.2 巨正则系综中粒子数和能量的涨落10.2.3 平衡态开放体系中的自发涨落、Onsager的涨落回归假设10.3 涨落的准热力学理论10.3.1 封闭体系热力学量的涨落10.3.2 开放体系热力学量的涨落10.3.3 临界点附近的涨落10.3.4 多变量涨落的准热力学理论参考文献第11章 动理学描述与Boltzmann方程11.1 Boltzmann方程11.1.1 混合稀薄气体11.1.2 几种平均速度的定义11.1.3 流向量11.1.4 Boltzmann方程11.2 Enskog方程11.2.1 性质的时间演化11.2.2 不变性质 χ 的Enskog方程11.3 Boltzmann的H定理11.4 微观变化的可逆性和宏观变化的不可逆性11.4.1

<<统计力学>>

Lagrange方程的时间反演可逆性11.4.2 Schrödinger方程的时间反演可逆性11.4.3 Loschmidt佯谬11.4.4 Zermelo佯谬参考文献第12章 概率论方法12.1 随机过程12.2 联合概率、条件概率、联合条件概率12.2.1 联合概率12.2.2 条件概率12.2.3 联合条件概率12.3 Markov过程、Chapman-Kolmogorov方程12.4 主方程12.5 Fokker-Planck方程12.6 从Fokker-Planck方程到Fick第二定律参考文献第13章 Brown运动、Langevin方程及Fokker-Planck方程13.1 Brown运动和Langevin方程13.1.1 无外场Langevin方程13.1.2 速度的自时间相关函数13.1.3 Brown粒子的均方位移13.1.4 唯象规律中的扩散系数13.2 从Langevin方程到Fokker-Planck方程13.2.1 无外场Langevin方程的Fokker-Planck方程13.2.2 过阻尼Langevin方程的Smoluchowski方程13.2.3 有外场Langevin方程的Fokker-Planck方程13.3 自由Brown运动Fokker-Planck方程的严格解参考文献第14章 线性响应理论14.1 静态线性响应14.1.1 经典力学中的静态线性响应14.1.2 量子力学中的静态线性响应14.2 动态线性响应14.2.1 经典力学中的动态线性响应14.2.2 量子力学中的动态线性响应14.2.3 Kubo变换14.2.4 复数方法、响应的频率关系14.2.5 响应函数的客观属性14.2.6 Kramers-Kronig关系式14.3 线性响应理论的应用14.3.1 离子淌度14.3.2 其他输运性质参考文献第15章 Zwanzig-Mori投影算符理论15.1 Zwanzig动理学方程15.1.1 投影算符15.1.2 Zwanzig动理学方程的导出15.2 广义Langevin方程15.2.1 Mori方法15.2.2 自时间相关函数15.2.3 Volterra方程与连分数15.3 应用实例15.3.1 电偶极矩对光的吸收15.3.2 纯转动光谱15.3.3 高聚物的Rouse-Zimm模型参考文献第16章 密度泛函理论16.1 多电子体系的密度泛函理论16.1.1 Hohenberg-Kohn第一定理16.1.2 Hohenberg-Kohn第二定理16.1.3 Levy约束搜索法16.1.4 基于第一原理的电负性、绝对硬度、Fukui函数16.1.5 最大硬度原理16.2 介观体系的密度泛函理论16.2.1 密度是外场 (r) 的泛函16.2.2 有限温度的变分原理参考文献附录A 赋范线性空间A.1 线性空间A.1.1 向量的线性相关和线性无关A.1.2 线性空间的基A.2 范数和赋范线性空间A.3 完备性A.4 内积空间和Hilbert空间A.4.1 内积和内积空间A.4.2 正交归一集A.4.3 Hilbert空间参考文献附录B 算符代数公式(证明略)B.1 线性算符B.2 逆算符B.3 对易子与反对易子B.4 酉算符UB.5 伴随算符和Hermite算符B.6 封闭关系与投影算符B.7 算符的迹B.8 算符与矩阵B.9 算符的函数B.10 算符微积分参考文献附录C 信息熵表式(2.5.1-3)的证明参考文献附录D 向量与张量分析D.1 Descartes张量D.2 向量分析初步D.3 二阶张量D.4 向量、张量基本公式D.4.1 基本等式 D.4.2 基本等式 D.4.3 与 r 有关的等式(3维空间)参考文献附录E 最陡下降法近似求解定积分、Stirling近似公式E.1 最陡下降法E.2 实例——近似求解Gamma积分、Stirling近似公式附录F 泛函的微积分F.1 泛函的定义和实例F.2 泛函的导数和变分F.2.1 泛函的导数F.2.2 泛函的变分F.3 Volterra展开、泛函的高阶导数与高阶变分F.4 泛函导数和变分的性质F.4.1 $\hat{L}(x)$ 是线性算子F.4.2 泛函乘积的求导F.4.3 Gelfand-Formin定理F.4.4 二阶泛函导数F.4.5 泛函求导的链式规则F.4.6 泛函导数之逆F.4.7 带参数的泛函F.4.8 泛函的函数及其导数参考文献附录G 凸函数、Jensen不等式和Gibbs不等式G.1 凸函数的定义G.2 凸函数的判别定理G.3 凸函数的充分判据G.4 凸函数的性质1——Jensen不等式G.5 Jensen不等式的用途G.6 Gibbs不等式的另一种形式G.7 凸函数的性质2——极小值定理参考文献附录H Fourier变换、Laplace变换H.1 一维Fourier变换H.2 三维Fourier变换H.3 Laplace变换H.4 算符代数中的Laplace变换参考文献附录I 概率论的公理化I.1 概率论的公理化体系I.2 概率的基本性质参考文献索引

<<统计力学>>

章节摘录

版权页：插图：在人类理解化学的历程中有两件事非常重要，一是建立现代的原子、分子学说，发生在从1803年的Dalton原子学说直到1908年J.B.Perrin的扩散实验证明Einstein与Boltzmann两个关于分子存在理论预见的正确。

二是热力学三大定律的确立（主要是发生在19世纪50年代确立能量转化与守恒的定律和热力学第二定律），于是导致F.W.Ostwald等为了“用物理的火炬照亮化学的暗室”，创建物理化学学科，奠定了化学理论的基点。

起先热力学是物理化学的主要部分，热力学完全不管物质具体的微观结构，它是无数实验事实总结出来的唯象规律（至于热力学与其他科学领域的唯象规律的根本区别，这里不予置评），于是热力学根据化学反应前后能量的变化可以回答反应是否可能，正因为如此，热力学无法回答由于体系微观结构的差别造成的化学性质的差别。

随着化学学科的发展，渴望把物质的宏观行为与其微观结构联系起来，由物质在分子层次的性质推断体系的宏观性质。

这就成为物理化学学科很自然要解决的核心问题，从而量子力学和统计力学两门学科就成为化学理论的两大组成部分。

原则上，量子力学或量子化学用以理解、解释物质的微观行为，统计力学根据由此得到的微观性质进而解释和理解体系的宏观行为和性质，这就是统计力学的任务所在。

<<统计力学>>

媒体关注与评论

“.....我国理论化学界量子力学讲得较多、较深，统计力学讲得较少、较浅，要改变这种不平衡的局面，也要看到量子力学和统计力学的融合是必经之途.要用统计的观点和系综的观点理解量子力学，而统计力学在很多场合也离不开量子观点..... 我认为这本书讲述的统计力学具有以下鲜明特点：
（1）该书一开始就立足于概率论即信息论的观点，引入纯态与混合态的概念，于是系综就自然地成为统计力学的基础..... （2）无论经典还是量子场合，该书都通过在不同的约束条件下的熵极大原理导出不同的系综理论..... （3）该书为了达到强调物理意义的目的，采取不回避数学问题的态度..... 该书将能较好地满足我国广大物理化学研究者、分子模拟和材料模拟研究者对理论的渴求.....我预期陈敏伯教授的这本书将有力地推动中国理论化学界中统计力学的学科建设，使新一代理论化学人才得到全面的理论培养！

” ——徐光宪，中国科学院院士 2011年予北京蓝旗营

<<统计力学>>

编辑推荐

《统计力学:理论化学用书》在比较严格的理论框架下,系统介绍统计力学。

《统计力学:理论化学用书》引入混合态的概念,把我们对自然界认识的起点建立在统计决定论上。并且大量运用变分原理,采取不回避数学的态度。

书后备有附录介绍多个数学工具,以方便阅读。

《统计力学:理论化学用书》可作为高等院校、研究所化学、物理、材料科学、生命科学等有关专业领域教师、科研人员的参考书和研究生教材。

<<统计力学>>

名人推荐

“……我国理论化学界量子力学讲得较多、较深，统计力学讲得较少、较浅，要改变这种不平衡的局面，也要看到量子力学和统计力学的融合是必经之途。

要用统计的观点和系综的观点理解量子力学，而统计力学在很多场合也离不开量子观点……我认为这本书讲述的统计力学具有以下鲜明特点：（1）该书一开始就立足于概率论即信息论的观点，引入纯态与混合态的概念，于是系综就自然地成为统计力学的基础……（2）无论经典还是量子场合，该书都通过在不同的约束条件下的熵极大原理导出不同的系综理论……（3）该书为了达到强调物理意义的目的，采取不回避数学问题的态度……该书将能较好地满足我国广大物理化学研究者、分子模拟和材料模拟研究者对理论的渴求……我预期陈敏伯教授的这本书将有力地推动中国理论化学界中统计力学的学科建设，使新一代理论化学人才得到全面的理论培养！

”——徐光宪，中国科学院院士

<<统计力学>>

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>