



# 对理论计算（材料）方向的课程推荐

<https://www.chem.pku.edu.cn/liuzhirong/Members/CurrentMembers/WangYingqi.html>

王瀛琦，北京大学化学学院在读博士生。元培学院（物理方向）本科毕业生、化学双学位。

王瀛琦（北京大学化学学院）  
2023/4/4

# 附：理论计算的课程基础要求

◆这里重点介绍一下对化学系学生有用的数学物理课程。括号里是推荐上课学期，例如1A表示第一学年秋季学期，5S表示研一春季学期。红色为必上。

## ◆数学基础

□**高等数学B** 00130201 (1A-1S) 不需注重定理的证明，会算最重要

□**线性代数B** 00131460 (1A-2A) 非常重要，越早修越好！

□推荐教材：Linear algebra done right by Sheldon Axler

□**概率统计B** 00132380/概率与数理统计 00331900 (1A-2S)

□**数学物理方法** 00432108/09/10 (1S-3A) 两学期3+3学分或者一学期4学分都行。重点是留数定理、积分变换、特殊函数以及格林函数方法。是四大力学的先修课。以掌握方法为主

□**群论I** 00400140 (3A/4A/5A) 李新征老师的“群论与量子力学”一章极重要。比结构化学和群论与化学的内容多。

□推荐教材：李新征《群论及其在凝聚态物理中的应用》； Dresselhaus

# 附：理论计算的课程基础要求

## ◆普通物理

- **普通物理I+II** 00431132/33 (1S-2A) 化院自己开的普通物理深度和广度都够，推荐
- 也可以选择物院普通物理五件套
  - 力学 00431110 (1A-2A)
  - 电磁学 00431155 (1S-2A)
  - 热学 00431154 (1S-2A)
  - 光学 00431144/56 (2A-3S) 有2学分和4学分
  - 原子物理学/近代物理 00431151/65 (2A-2S) 如果学量子力学有困难可以考虑
  - 推荐教材：费恩曼物理学讲义
- 建议：普物I+II足够。注重基本概念和物理图像即可

# 附：理论计算的课程基础要求

## ◆ 四大力学和固体物理

- 刘川老师写过四大力学+固体物理的讲义，可以参考。
- 物理学院的一些四大力学课分A和B，B一般会容易一些
- 理论力学 00432198/99（2A-3A）
  - 上一下有好处（也可以自学）。需要注重拉格朗日力学和哈密顿力学的形式化理论。选4学分的课还可以听到连续介质的力学系统和经典场论，为进一步的学习打基础。
  - 推荐教材1：Classical Mechanics (3ed) by Herbert Goldstein（适合自学）
  - 推荐教材2：Landau第一卷（有翻译版，适合复习）
- 电动力学 00432140/41（2S-4S）
  - 技巧性非常高的一门课程。时间不够的话可以自学
  - 推荐教材1：Introduction to electrodynamics by D. J. Griffiths（有翻译版，新手友好，配合习题使用）
  - 推荐教材2：Classical electrodynamics by J. D. Jackson（非常经典的教材，据说没人把这本书的习题都刷完）

# 附：理论计算的课程基础要求

□平衡态统计物理 00431650/热力学与统计物理 00432130 (2A-3S) /统计热力学 01014250 (5S)

□非常重要，材料方向必修。目前有马中水/宋慧超/黄华卿/徐莉梅老师的班级。内容涉及：热力学基本理论的回顾、统计系综、量子理想气体、二级相变平均场理论等。也可以选择化院研究生课程统计热力学（刘志荣/厉建龙）。（作为物化I的进一步扩充）

□推荐教材1：Concepts in Thermal Physics by S. J. Blundell（有翻译版《热物理概念》，热力学概念梳理）

□推荐教材2：刘志荣《统计热力学》

□推荐教材3：Statistical Physics of Particles by M. Kardar（很好读的英文教材，不长）

□推荐教材4：Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity by J. P. Sethna（进阶教程，内容较新，有一些例子）

# 附：理论计算的课程基础要求

## □量子力学 00432150/49 (2A-3S)

- 非常重要。内容至少包括量子力学的基本假设、薛定谔方程及基本解、自旋、全同粒子、定态微扰、变分原理。还可能有含时微扰、WKB近似、散射等
- 上课的老师很多，且每年都有变化。有英文班和中文班。考试是统考
- 量子力学的优秀教材和讲义非常多，只推荐一些我多多少少看过的：
- 推荐教材1：Quantum Mechanics by Claude Cohen-Tannoudji（有点长但是很详细，非常适合自学）
- 推荐教材2：Introduction to Quantum Mechanics by D. J. Griffiths（有翻译版，适合初学，上手快，配合习题使用。注重应用而非概念的理解。缺点是没有将狄拉克符号贯穿始终。）
- 推荐教材3：Modern Quantum Mechanics by J. J. Sakurai（进阶到高量用，读完Griffiths可以看。角动量一章写得非常漂亮，必读。）
- 推荐教材4：Lectures on Quantum Mechanics by Steven Weinberg（有很多篇幅用来讲散射。向量子场论过渡）

## □量子力学II 00432216（暑校）钱志新老师

- 在量子力学课程基础上，介绍多电子原子的基本理论；分子转动谱和振动谱及价键理论；路径积分方法介绍；更多近似方法介绍；量子力学中的相位效应

# 附：理论计算的课程基础要求

## □ 固体物理 00432510 (2S/3S/4S)

- 从2024年起，中文班将由冯济老师/杨金波教授，英文班是刘雄军和陈剑豪老师教授。
- 英文班的参考书是Ashcroft and Mermin，我估计中文班的参考书会是Girvin and Yang前9章
- 固体物理的topic很杂，每个班都有自己的风格。但基础内容一定包括晶体结构、晶格振动、能带理论、晶体中电子运动（准经典）、金属中的电子输运理论、半导体电子论。每一章都非常重要。不同教材的侧重点不一样，多看几本会有好处
- 参考教材1：黄昆 韩汝琦《固体物理学》（前7章，很经典的中文教材，但是typo极多，读的时候要对照勘误表。）
- 参考教材2：Solid State Physics: Essential Concepts by David W. Snoke（前5章，内容涉及能带理论、准粒子、经典波、量子波、准粒子之间的耦合。注重二次量子化表述，风格简洁易读，推荐）
- 参考教材3：Solid State Physics by N. Ashcroft and N. Mermin（英文班的主要教材）
- 参考教材4：Modern Condensed Matter Physics by Steven M. Girvin and Kun Yang（内容很全，有些是介绍性质。用它入门会有些困难）
- 参考教材5：Solid State Properties by M. Dresselhaus（MIT的课程讲义改编，实际例子很多）



# 附：理论计算的课程基础要求

## ◆进阶课程（研究生）

- 警告△：有四大力学和固体物理的基础就可以做课题了，之后的课程学习要加强针对性
- 高等量子力学 00410340（3A/4A/5A）尹澜（中文班）/张亿（英文班）
  - 内容涉及量子动力学、角动量、对称性、近似方法、散射理论、二次量子化、相对论量子力学，进阶课程的先修课
  - 推荐教材：Modern Quantum Mechanics by J. J. Sakurai
  - 英文班参考了Berkeley的讲义，参见<https://bohr.physics.berkeley.edu/classes/221/2021/221.html>
- 量子统计物理 00410440（4A/5A）钱志新/宋志达
  - 内容涉及系综理论、理想量子气体、朗道费米液体理论、集团展开、玻色液体（超流，Bogoliubov变换）、超导体的热力学、伊辛模型、相变
  - 推荐教材1：Statistical Mechanics by R. K. Pathria
  - 推荐教材2：朗道第九卷-统计物理学II（费米液体理论）



# 附：理论计算的课程基础要求

## □ 固体理论 00411140 (4S/5S) 冯济 (英文班) / 尹澜 (中文班)

□ 非常重要，做材料计算不着急学，如果要推公式最好还是学一下

□ 跟固体物理一样，topic极多，英文班这学期主讲interacting electron gas, band structure theory, electronic transport, geometry of band structure, magnetism, superconductivity, 都是材料研究的重中之重，学完以后读文献会轻松很多

□ 参考教材1: Solid State Physics: Essential Concepts by David W. Snoke (7-11章)

□ 参考教材2: Modern Condensed Matter Physics by Steven M. Girvin and Kun Yang (第10章以后, QHE家族的系统性介绍是亮点)

□ 参考教材3: 李正中《固体理论》(标准的中文教材, 数学要求较高)

□ 参考教材4: Quantum Theory of the Electron Liquid by G. F. Giuliani and G. Vignale (一个非常详细的线性响应理论、费米液体和DFT的介绍)

□ 多体理论/凝聚态场论的教材对学习固体理论有帮助 (可以参考Mahan/Fetter/Altland/...)

## □ 量子场论 00410640 (5A/6A) 檀时钠/马滢青

# 附：理论计算的课程基础要求

- 密度泛函理论及其应用 00415490 (4A/5A) 吕劲

- 会有上机

- 量子多体理论 00400440 (5A/6A) Ryuichi Shindou

- The course begins with a review of second quantization, goes through field theories at zero and finite temperatures, linear response theory, field theory of electron-phonon coupled systems and finally covers microscopic theories of superconductivity and its electromagnetic properties. Through this course, students get familiar with Green function methods of quantum many-particle systems, and learn basics of electromagnetic and thermodynamic properties of superconductivity and metals, as well as collective modes in solids.

- 多体系统的量子理论 00405595 (4S/5S) 李新征、施均仁

- Second quantization, Green's functions, functional integrals, perturbation theory, effective action theory and energy functionals, theory of electron liquid, phase transitions and spontaneous symmetry breaking

- HF/CI/CC, DFT, GW, QMC (作为量子化学的补充)

# 附：理论计算的课程基础要求

## ◆ 化学学院课程（本科&研究生）

- 物理化学I+II
- 结构化学（学分要求上可以用固体物理替代）
- 中级物理化学 难度大致与量子力学B相当
- 理论与计算化学I
- 量子化学 主要讲解HF/MBPT/CI/CC/DFT
- 机器学习在化学中的应用
- 统计热力学
- 化学中的数学
- 高等物理化学
- 软物质与硬科学

## ◆ 其他课程

- 计算概论、数据结构与算法、计算物理学（或者计算机学院的数值方法等）