

<<基础量子化学与应用>>

图书基本信息

书名：<<基础量子化学与应用>>

13位ISBN编号：9787040144482

10位ISBN编号：7040144484

出版时间：2004-7

出版范围：高等教育

作者：刘靖疆

页数：498

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>

## <<基础量子化学与应用>>

### 前言

自1997年，南开大学化学学院开始进行面向21世纪的化学教育改革试点，首先参考了国内外高校的先进化学教育方案，设计了一套创新的教学计划和课程体系，优化的化学课程设置体例如下。

大学本科一年级第一门启蒙课程“化学概论”，即国际高校通行的General Chemistry，过去此课程名称错译为“普通化学”，在当前改革大潮之际，应及时加以纠正。

经征求教育部高教司的同意，正式定名为“化学概论”。

这门课程的教学目的是：以概论的形式向学生讲授化学学科的科学属性，它在科学体系中的地位及其与其他相关学科的关系，它在人类社会中对人类生活与生产的作用与意义；本学科的发展历史和它在当代的发展形势，特别是它的分支学科与边缘交叉学科在进入新世纪的发展趋势，它对支持人类社会可持续发展中的重要作用；本学科的教学计划和培养目标，对学生的要求等等。

本课程是一门学科概貌的引论课，是高中化学与大学化学沟通的桥梁课，既是通才教育课，又是素质教育课，同时也是本门学科基础知识讲授课，教书育人，多种任务并举。

采用的主教材是申泮文主编的《近代化学导论》（高等教育出版社，2002）。

## <<基础量子化学与应用>>

### 内容概要

《基础量子化学与应用》共13章，分二三个部分，第1~5章为基本原理及定性部分；第6~10章为定量部分；第11~13章为专题。

在化学键理论中讨论了共价键、配价键、金属键的多种模型，对获Nobel奖的“前线轨道理论、量子化学计算方法中的从头计算法和密度泛函法”作了重点介绍，同时也介绍了IR、uV、NMR、EsR等光谱的基础。

书中安排了应用Gaussian程序的上机计算内容，还讨论了化学反应速率、固体量子化学及分子工程学中量子化学的作用。

《基础量子化学与应用》可作为高等学校化学、化工专业本科高年级学生及非物理化学研究生的教材，也可作为相关々业学生及技术人员的参考书。

<<基础量子化学与应用>>

作者简介

刘靖疆，1934年生于天津。  
1955年毕业于北京大学化学系。  
长期以来从事结构化学和应用量子化学方面的教学和科研工作。  
为全国科学大会集体奖技术骨干；还曾获得部级科技二等奖，译著各一部，论文五十余篇。  
现为南开大学教授。

## &lt;&lt;基础量子化学与应用&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 量子力学基础一、基本假设1.假设I——状态函数和概率2.假设——力学量与线性Hermite算符3.假设——本征态和本征值4.假设——平均值5.假设V——态随时间变化的Schrodinger方程6.示例二、算符1.算符的相等2.算符的加法和乘法3.算符的对易4.线性算符5.算符的本征值与本征函数6.Hermite算符三、力学量同时具有确定值的条件四、不确定性原理五、Pauli原理六、Hellmann-Feynman定理七、维里定理八、简单体系的精确解1.一维空间的自由粒子2.一维方势阱3.一维谐振子4.粒子在有心力场中的运动5.双原子分子的转动6.小结九、Dirac符号1.内积2.共轭线性算子3.单位算子4.矩阵元5.态及矩阵元的时间变率第二章 变分法与Hückel分子轨道法一、变分法1.原理2.氢原子基态二、线性变分法三、HMO的基本原理1.假定2.举例3.杂原子的引入四、具有重复单元分子的HMO——差分方程法1.多烯烃2.环多烯烃3.环烯烃的芳香性五、体系的处理1.LCB0近似2.LCA0方法第三章 定态微扰法与微扰分子轨道法一、定态微扰理论1.无简并情况下的一级微扰2.无简并情况下的二级微扰3.简并情况下的微扰4.类氢离子的基态5.氢原子的Stark效应二、PMO法1.库仑积分的改变对分子轨道的影响2.共振积分的改变对分子轨道的影响三、PMO关于芳香性的讨论四、广义微扰理论1.分子间的一级微扰2.分子间的二级微扰3.广义微扰理论第四章 化学键理论一、化学键二、共价键理论1.共价键的两种模型2.价键理论3.分子轨道和定域化键4.共价的新定义与nxc格式5.价键理论与分子轨道理论在全组态意义下的统一三、配价键理论1.晶体场理论2.分子轨道理论3.应用示例：对称禁阻反应的解禁四、金属键理论1.自由电子理论2.价键理论五、分子力学1.分子力场2.分子间作用力场3.近期开发出的力场第五章 前线轨道理论一、前线轨道理论概述1.原始的前线轨道理论2.前线轨道的相互作用3.应用示例二、游离基反应的前线轨道理论1.亲核和亲电游离基2.氢和卤原子的夺取3.向双键的加成反应三、光化学反应的前线轨道理论1.光化学反应的前线轨道相互作用2.光化芳香取代反应3.烯烃的二聚4.胸腺嘧啶的光致二聚四、微扰理论结果1.估算反应性的前线轨道方程2.离子反应3.双烯加成的定向选择性五、FMO的应用范围六、相互作用前线轨道第六章 群论简介一、群论基础1.定义2.乘法表3.基在群元素作用下的变换二、群表示理论与特征标1.群的矩阵表示2.不可约表示与可约表示3.特征标三、对称匹配函数1.波函数作为不可约表示的基2.投影算符3.对称匹配函数的构造四、久期行列式的简化1.积分值的判断2.久期行列式的简化五、关于群的补充知识1.群元素的类2.子群3.广义正交定理4.有关不可约表示的几个规则5.直积表示六、晶体场中中心原子的能级分裂1.原子轨道构成三维旋转群不可约表示基2.晶体场中的能级分裂七、分子振动1.简正坐标2.分子振动可约表示特征标；(R)的计算及分析3.对称坐标的生成4.利用简并度判断结构对称性八、位置群与商群\_位置群分析2.商群分析九、置换群1.置换与置换群2.轮换和对换3.共轭类与分割4.Young表5.基函数附录化学上重要对称群的特征标表第七章 角动量一、角动量一般理论1.轨道角动量算符2.轨道角动量的对易关系二、原子的中心场近似三、自旋角动量1.实验基础2.自旋算符和自旋波函数3.自旋多重态4.自旋算符与波函数的矩阵表示四、角动量耦合五、自旋-轨道相互作用六、自由的复杂原子1.组态及谱项2.波函数3.电子相互作用七、配体场中的离子1.弱场情况2.强场情况八、核自旋耦合与NMR1.两个自旋1/2等同核的体系2.两个自旋1/2非等同核的体系九、核与电子自旋耦合及ESR1.超精细分裂2.有机自由基的ESR第八章 量子化学计算方法一、原子轨道线性组合的分子轨道法1.Hartree-Fock-Roothaan方程2.从头计算法3.模型势方法4.经验与半经验方法二、密度泛函理论1.泛函与变分知识准备2.Thomas-Fermi模型3.Hohenberg-Kohn引理4.：Hohenberg-Kohn定理5.Kohn-Sham方案6.广义梯度近似7.离散变分的密度泛函理论8.应用示例三、Xa方法1.方法概要2.应用示例四、电子相关性1.组态相互作用法2.Miller-Plesset微扰法3.密度函数方法五、大分子体系的量子化学计算方法进展1.定域分子轨道法2.线性标度半经验量子化学方法上机实习1.标准几何模型2.计算题第九章 含时微扰与光谱跃迁一、含时微扰二、Einstein吸收和发射系数三、跃迁矩四、氢原子的选择定则五、简谐振子的选择定则六、多原子分子的电子光谱1.Fran：k-Condon原理2.多原子分子电子光谱概况3.电荷转移跃迁七、跃迁概率的群论讨论1.原则表述2.电子光谱3.振动光谱八、旋光性与圆二色性谱第十章 量子统计力学概述一、三种统计系综二、三种统计法1.Bose-Einstein统计法2.Fermi-Dirac统计法3.Maxwell-Boltzmann统计法4.理想气体的：Boltzmann统计三、应用示例1.橡胶的高弹性2.金属中自由电子对热容的贡献3.光的黑体辐射4.

## &lt;&lt;基础量子化学与应用&gt;&gt;

固体热容5. 超导电性与超流动性第十一章 化学反应速率一、过渡状态理论1. 基本假定2. Eyring公式3. 几点讨论和发展二、势能面1. 若干实例2. 几个基本概念3. 溶剂效应三、内禀反应坐标四、微观反应机理的实验结果1. 红外化学发光法2. 激光诱导荧光法3. 交叉分子束五、分子的碰撞截面1. 反应碰撞截面2. 势能线相交与鱼叉机理3. 反应截面与速率常数六、反应散射的量子理论1. 散射矩阵2. Lippmann-Schwinger方程3. Born近似4. 重叠法第十二章 固体量子化学一、空间群二、倒易晶格1. 晶格周期性2. 倒易晶格具有晶格同样的点群3. Brillouin区三、Bloch函数1. Brn-vonKarmann循环边界条件2. 平移对称性3. Bloch函数四、时间反演与Kramers简并五、能带结构与态密度1. 能带结构2. 态密度六、固体量子化学计算方法1. 晶体轨道法2. 分子簇法1. 简正坐标表示的经典Hamilton2. Hamilton算符的二次量子化表示3. 粒子数表象八、电子-声子相互作用与电阻九、离子晶体的铁磁性十、低维固体及其电性质1. Peierls不稳定性2. 孤子十一、高温超导体1.  $A_xC_6O_2$ . 氧化物超导体第十三章 量子化学与分子力学在分子设计及分子工程学中的应用一、药物设计1. 间接药物设计2. 直接药物设计3. 成功例证二、非线性光学材料1. 无机倍频晶体2. 有机非线性光学材料三、超硬材料的设计与合成四、高能密度材料的理论探索1. 氮原子簇2.  $(CH)_8-nN_n$ 型化合物3. 环五甲撑五硝胺4. 多异氰基立方烷五、缓蚀剂1. 缓蚀机理探讨2. 新缓蚀剂的设计与合成六、麝香香气的分子结构基础1. 麝香香气化合物的结构类型2. 麝香香气产生的分子作用模型3. 硝基麝香的作用模型七、电致发光材料附录1. 基本常数及换算因子2. Gaussian98程序使用简介

<<基础量子化学与应用>>

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>