

<<量子化学简明教程>>

图书基本信息

书名：<<量子化学简明教程>>

13位ISBN编号：9787502565626

10位ISBN编号：7502565620

出版时间：2005-8

出版时间：化学工业出版社

作者：林梦海

页数：277

字数：443000

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>

## <<量子化学简明教程>>

### 内容概要

本书的出版旨在为应用化学、化工等非理论化学专业的研究生提供一本简明、实用的量子化学教材。全书共分12章,包括量子力学基础、简单应用、原子结构、近似方法、分子结构、群论基础、群论应用、分子光谱、电子相关、价键理论、密度泛函理论以及量子化学计算简介。书中附有必要的习题和习题选答及对称群的特征标表。

本书可供应用化学、化工、材料化学、生物化学等专业的研究生及其他相关人员使用。

## &lt;&lt;量子化学简明教程&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 量子力学基础 1.1 量子力学的建立 1.1.1 三个重要实验 1.1.2 德布罗意物质波 1.1.3 Schrödinger方程和Heisenberg矩阵力学 1.1.4 “测不准”关系 1.2 量子力学的基本假设 1.2.1 假设——状态波函数和概率 1.2.2 假设——力学量与线性自共轭(Hermite)算符 1.2.3 假设——Schrödinger方程 1.2.4 假设——态叠加原理 1.2.5 假设——Pauli不相容原理 1.3 量子力学的一些基本概念 1.3.1 全同粒子 1.3.2 宇称 1.3.3 Dirac符号 1.3.4 Schrödinger表象与Heisenberg表象 习题 参考资料第2章 简单应用 2.1 势箱中的自由粒子 2.1.1 一维势箱 2.1.2 三维势箱 2.1.3 应用 2.2 谐振子 2.2.1 一维谐振子 2.2.2 Hermite多项式的性质 2.2.3 应用(双原子分子振动) 2.3 角动量与自旋 2.3.1 轨道角动量 2.3.2 升降算符 2.3.3 自旋算符 2.4 隧道效应及其应用 2.4.1 隧道效应 2.4.2 应用 习题 参考资料第3章 原子结构 3.1 类氢离子的Schrodinger方程 3.1.1 类氢离子的Schrodinger方程 3.1.2 变数分离 3.1.3 方程的解 3.1.4 方程的解 3.1.5 R方程的解 3.1.6 量子数的取值 3.2 类氢离子波函数 3.2.1 主量子数n与能级 3.2.2 量子数l, m的物理意义 3.2.3 径向部分函数 3.2.4 角度分布函数 3.2.5 原子轨道图 3.3 He原子波函数和Slater行列式 3.3.1 He原子波函数 3.3.2 Slater行列式 3.4 原子角动量与光谱项 3.4.1 角动量耦合 3.4.2 原子光谱项 3.4.3 组态的能级分裂 3.5 谱项波函数与能量 3.5.1 谱项波函数 3.5.2 谱项能量 3.6 磁相互作用 3.6.1 旋轨耦合能 3.6.2 磁场中能级分裂 3.6.3 Zeeman效应 习题 参考资料第4章 近似方法 4.1 非简并微扰理论 4.1.1 非简并微扰理论概述 4.1.2 Brillouin-Wigner微扰展开 4.1.3 Muller-Plesset微扰能 4.2 微扰理论的应用 4.2.1 非谐振子 4.2.2 基态氦原子 4.3 简并态微扰理论 4.3.1 简并态微扰理论概述 4.3.2 氢原子的斯塔克效应 4.4 变分法 4.4.1 变分法概述 4.4.2 氦原子的变分处理 4.4.3 线性变分法 4.4.4 Li原子的变分处理 4.5 Hartree-Fock自洽场方法 4.5.1 自洽场方法 4.5.2 Hellmann-Feynman定理 4.5.3 维理定理 习题 参考资料第5章 分子结构……第6章 群论基础第7章 群论应用第8章 分子光谱第9章 电子相关第10章 价键理论方法第11章 密度泛函理论第12章 量子化学计算简介附录一 习题选答附录二 单位、物理常数和换算因子附录三 化学上重要对称群的特征标表

## &lt;&lt;量子化学简明教程&gt;&gt;

## 媒体关注与评论

前言 量子化学是用量子力学原理研究原子、分子和固体的电子结构,研究分子间相互作用、化学反应等理论的学科,量子化学理论已广泛地应用于无机化学、有机化学、分析化学及生物化学、材料化学等相关学科,成为实验学科的有力助手。

量子化学课程是化学、化工、材料化学及生物化学等专业研究生必修的一门学位课,该课程一贯以理论严谨、内容深奥、学习艰难而著称,使许多初学者束手无策。而艰难地学习了量子化学理论后又深感困惑,不知如何将这些理论应用于化学实际。近年研究生招收一再扩大,授课学时不断压缩,使这一情况更为加剧。

为了使应用化学、化学工程等非理论化学专业的研究生能在较短时间内掌握量子化学原理,特编写了这本简明教程。

教材定位在读者只要具备大学化学基础知识、熟悉微积分就能读懂。

教材编写尽量深入浅出,1~6章描述量子化学基本原理时,都备有一定的应用例子。

7、8章则是量子化学原理在无机化学(配位场)、有机化学(反应对称守恒)、分析化学(分子光谱)等方面应用的范例。

若授课学时为60学时,一般可讲授1~8章;若有90学时,可进一步介绍电子相关,价键理论,密度泛函及量子化学计算(9~12章)。

书中附有必要的习题,在学习过程中,通过习题可进一步加深对内容的理解。

由于篇幅限制,有些定理的严格证明予以省略,使数学严谨性也有所牺牲,希望不影响对定理的正确理解。

为了适应不同学生的需求,在每章后面附有进一步阅读材料和参考文献,供有余力的学生进一步提高。

由于笔者水平有限,且编写时间仓促,难免有疏漏或不当之处,敬请读者批评指正。

本书写成时,恰逢徐光宪先生从教60周年庆典。

笔者正是学习徐先生的《物质结构》、《量子化学》教材,在徐先生关怀下成长起来的众多学者之一。

在此谨以此书向徐先生表示崇高的敬意和热烈的祝贺。

## <<量子化学简明教程>>

### 编辑推荐

本书的出版旨在为应用化学、化工等非理论化学专业的研究生提供一本简明、实用的量子化学教材。

<<量子化学简明教程>>

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>