

<<分子结构参量及其与物性关联规律>>

图书基本信息

书名：<<分子结构参量及其与物性关联规律>>

13位ISBN编号：9787030183484

10位ISBN编号：7030183487

出版时间：2007-3

出版时间：科学

作者：杨频

页数：399

字数：503000

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>

<<分子结构参量及其与物性关联规律>>

内容概要

本书从分子中的电荷分布切入，较全面地介绍在现代量子理论上建立的分子结构参量方法，并从归纳和演绎两个方面系统介绍它们与物性关联的规律，以使成千上万的物性系统化。

本书较全面地介绍了预示化合物和材料物理化学性质的多种规律，可为新材料的设计和研发提供线索。

本书可供物理、化学、化工、材料科学、冶金等方面的科技人员和相关专业的教师研究生和高年级本科生参考。

<<分子结构参量及其与物性关联规律>>

书籍目录

序 前言第1章 作为分子结构参量基础的量子理论— 1.1 量子理论的基本方程和方法 1.1.1 Schrödinger方程 1.1.2 量子化学计算的三个基本近似 1.1.3 分子轨道理论 1.1.4 变分法 1.2 量子化学从头计算法 1.2.1 Hartree—Fock方程和白洽场 (Self consistent field, SCF) 方法 1.2.2 Hartree—Fock—Roothaan (HFR) 方程 1.2.3 从头计算 (ab initio) 法 1.3 电子相关和组态相互作用 1.3.1 电子相关 1.3.2 组态相互作用 1.3.3 MP微扰理论 1.4 位力定理 1.4.1 位力定理的证明 1.4.2 不同条件下的表示 1.4.3 双原子键合行为 1.5 Hellmann—Feynman定理 1.5.1 广义微分Hellmann-Feynman 1.5.2 Hellmann—Feynman静电定理 1.5.3 积分Hellmann—Feynman定理 1.6 Koopmans定理 参考文献第2章 分子中的电荷分布和分子结构参量 2.1 分子中的电荷分布和化学键的性质 2.1.1 Mulliken集居数分析 2.1.2 密度函数积分法 2.1.3 其他方法 2.2 键级、自由价和诱导效应 2.2.1 键级 2.2.2 自由价指数 2.2.3 键长 2.2.4 游离基反应 2.2.5 亲电反应与亲核反应 2.2.6 诱导效应 2.2.7 致癌活性和抗癌活性 2.3 离子键和共价键的特点与表征 2.3.1 离子键与共价键的特征 2.3.2 键的离子性表示 2.3.3 键型的连续和不连续过渡 2.4 键能与键的解离能 2.4.1 概述 2.4.2 半经验计算 2.5 键的伸缩力常数 2.5.1 谐振子与非谐振子模型 2.5.2 力常数与解离能的关系 2.5.3 计算伸缩力常数的半经验方法 参考文献第3章 分子结构参量的静电模型 3.1 分子的Berlin模型和差密度图 3.1.1 分子的Berlin模型 3.1.2 差密度图 3.2 NakaSuji的静电力 (ESF) 理论 3.3 键的离子性和总极性 3.3.1 二中心键的三点键合模型 3.3.2 键的离子性和电负性 3.3.3 键的总极性及其经验公式 3.3.4 键的离子性和总极性的关系 3.3.5 结论 3.4 双原子键的三中心静电模型 3.4.1 模型和参量的推导 3.4.2 模型的应用和一些物理常数的理论表示第4章 有效键电荷和有效核电荷与物性的关联第5章 荷移热指数与物性的关联第6章 电负性的表征和电负性均衡原理第7章 电负性与物性的关联第8章 分子结构参量的近代发展第9章 分子的总体分类——分子片和分子的四维结构参量附录

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>