第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

图书基本信息

书名：<<多面体分子轨道>>

13位ISBN编号：9787030222374

10位ISBN编号：7030222377

出版时间：2008-7

出版时间：科学出版社

作者：张乾二

页数：252

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

第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

内容概要

多面体分子轨道理论是研究原子簇结构化学及其化学键理论的基本课题之一。
本书应用群论方法，较为系统地论述了多面体分子轨道理论，解决了多面体分子轨道的构造及其成键性质的判据，提出量子化学的一些基本计算，例如旋转群一点群偶合系数、点群V系数、群重叠积分、对称性分子轨道和单粒子作用能矩阵元等的计算，对任何具有一定对称性的体系都是普遍适用的。为方便读者，第一章扼要介绍了角动量理论的基础，书末还附录了具有实用价值的图、表、数据和微机计算程序。
本书可供理论化学、原子簇化学、合成化学、金属有机化学及催化化学等专业研究生和科研人员参考。

第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

作者简介

张乾二，量子化学家。
福建惠安人。
1928年8月出生于福建惠安。
1947　年就读于厦门大学化学系，1951年被录取为研究生。
1954年厦门大学化学系毕业。
曾任厦门大学化学系主任、中国科学院福建物质结构研究所所长、厦门大学化学化工学院院长、固体表面物理化学国家重点实验室副主任；现任固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会主任、结构化学国家重点实验室学术委员会主任，厦门大学教授，中国科学院福建物质结构研究所研究员。
1991年当选中国科学院院士（学部委员）。

第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

书籍目录

第二版前言第一版前言第一章 三维空间旋转群的不可约表示 1.1 旋转操作与角动量算子 1.2 角动量算子的性质 1.3 三维空间旋转群的不可约表示 1.4 旋转矩阵元的性质 1.5 旋转矩阵元的物理意义 参考文献第二章 基向量变换定理及其应用 2.1 基向量变换定理及其应用 2.2 实表示旋转矩阵元Dlm'λ'，mλ（α，β，γ） 2.3 轨道性格 2.4 多面体对称性轨道的构造 2.5 杂化轨道的构造 2.6 群重叠积分的计算参考文献第三章 双陪集和对称性轨道 3.1 双陪集 3.2 点群的双陪集 3.3 投影算子 3.4 球谐函数的对称化 3.5 点群的V系数 参考文献第四章 多面体分子轨道的成键性质 4.1 张量面球谐函数的轨道性格诠释 4.2 群重叠积分和能量矩阵元 4.3 多面体分子轨道的字称与BT的对称关系 4.4 Br的正交归一化性质 4.5 Br与群重叠g3r的关系及其计算 4.6 标准三角积分Smλpq和作用能矩阵元Fmλpq的计算 4.7 多面体分子轨道的成键性质 参考文献第五章 应用 5.1 对称性轨道 5.2 能量矩阵元计算 5.3 轨道成键性质判断 参考文献附录 附录A 轨道性格 附录B 旋转群不可约基向量与O、I群不可约基向量的变换系数表 附录C 附录D 附录E 多面体群不变量Br和标准三角形△r数值表 附录F 标准三角积分曲线 附录G

第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

章节摘录

第一章　三维空间旋转群的不可约表示　　随着计算技术的发展，由Hartree所创立的自洽场（SCF）方法，已成为处理原子及分子结构问题的基本方法之一。
在中心力场模型中，原子的单电子波函数采用径向函数与球谐函数相乘积的形式；在LCAO-MO近似中，分子的单电子波函数则取原子的单电子波函数的线性组合，分子轨道的变换性质可以采用与其对称性匹配的原子轨道来研究。
因此，量子化学中的计算有很多是与球谐函数的性质密切相关的。
　　球谐函数的变换是本书的首要基础内容之一，因此，我们首先讨论旋转对称操作与角动量的关系，找出旋转群的不可约表示矩阵元，再由不可约表示矩阵元的性质，导出球谐函数的一些重要关系式。
　　1.1　旋转操作与角动量算子　　从守恒定律看，当作用在体系上的总力为零时，体系的线动量是守恒的，当没有力矩作用在体系上时，体系的角动量是守恒的；对于空间而言，在平移不变性条件下，体系的线动量是守恒的，而在旋转不变性条件下，体系的角动量是守恒的。
由此可见，体系的物理量的守恒总是同空间的对称性相联系的。
在量子力学中，这种服从守恒定律的物理量，可以作为对体系量子状态分类的依据。
在原子的中心力场模型或在分子的点群对称性中，我们所遇到的势场具有不同程度的空间旋转不变性，因此，我们着重讨论旋转与角动量的关系。
　　1.函数的旋转变换

第一图书网, tushu007.com

<<多面体分子轨道>>

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