第一图书网, tushu007.com

<<量子化学基础>>

图书基本信息

书名：<<量子化学基础>>

13位ISBN编号：9787030263247

10位ISBN编号：7030263243

出版时间：2010-1

出版时间：科学出版社

作者：夏少武，夏树伟 著

页数：355

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

前言

目前，化学仍然是一门实验科学。
但是，人们一直在探究发生化学反应的原因是什么，实验中的一些现象如何解释，判断所得产物的根据是什么，一些经验规律的内在原因是什么。
这就是说，化学需要从经验上升到理论，需要理论指导实验。
要建立化学理论，必须找出化学反应的共性特征。
由于化学反应种类的多样性，不同的化学反应有不同的特点。
找出化学反应的共性特征，提出化学理论，是化学工作者多年来追求的方向。
量子力学是研究微观粒子运动规律的理论基础，是在20世纪初到20年代建立起来的，并很快就应用到化学中来：1927年，Heitler和L.ondon用量子力学研究氢分子，为价键理论的建立打下了基础；20世纪30年代，Milliken和Slater等提出分子轨道理论；50年代以来，计算机的出现和发展促进了计算方法的发展，加强了结构与性质关系的研究……量子化学就这样形成了。
量子化学是用量子力学研究化学问题的科学。
从量子化学角度看，化学反应是原子核重新排布的过程，化学作用主要是原子核与外层电子以及电子之间的作用，量子化学抓住化学作用这一内在的共性特征，分析、解释物质的化学稳定性与分子结构及性质的关系，提出化学反应的量子理论，进而指导化学实验工作。
当前量子化学广泛应用于化学各分支领域中，如无机化学、有机化学、分析化学、高分子化学、生物化学、材料化学等。
随着高速电子计算机的普及，人们已经能够对一些复杂分子进行计算，进一步了解了结构与性质的关系。
概括来说，量子化学使人们能够从微观水平描述化学作用。
对于一些当前实验难以测定的反应过渡态、中间体，通过计算可得到电子结构、几何结构，进而有助于确定反应机理，解释实验结果。
由此可见量子化学的重要性。
当然，量子化学也有一定的局限性，它不是人类追求的最终真理。
量子化学当前还存在一定的困难，如缺乏预言能力、对于较大分子体系的计算采用过多的近似等，随着量子理论的发展，量子化学理论会逐步建立和完善。
有志于发展化学理论的人，应把量子化学作为一个阶梯，沿着这个方向继续前进。
基本概念与原理是学习量子化学的难点。
人们习惯于根据已有的知识和经验去思考新问题、分析新现象，这种逻辑思维方法有一定的合理性，但也存在着束缚人们思维的不利方面。
这种束缚经常是习惯性的，因而不易摆脱。
量子化学初学者从Newton力学过渡到量子力学，必须善于摆脱Newton力学的束缚，深入到微观物质世界领域，接受量子化学概念与原理，建立起量子理论观点，用以分析化学问题、解释实验结果。
学习量子化学的另外一个难点是数学公式较多。
但就本书而言，没有较深的数学知识，只要学过高等数学以及线性代数的基础知识，再了解几个特殊函数就可以阅读本书。
读者一看见较复杂的数学公式，就认为是多难的数学问题，其实只是常见的微积分。

第一图书网, tushu007.com

<<量子化学基础>>

内容概要

量子力学基础及简单应用；普通原理和定理，主要介绍变分法、Hellmann-Fcynman定理、virial定理；定态微扰方法及其应用；角动量，主要介绍轨道角动量、自旋角动量、角动量的耦合与引入光谱项的原因；群论简介；含时微扰方法与量子跃迁；自治场方法，主要介绍HF方程与HFR方程；电子相关；密度泛函理论；布居数分析和频率分析，主要介绍不同类型的布居数分析、热力学函数、过渡态的计算方法；量子化学的计算方法，主要介绍从头计算法。
书中用。
号标记的章节可作为选讲内容。
《量子化学基础》可作为高等院校化学、化学工程与工艺、材料化学、生物化学等专业高年级本科生和研究生教材，也可供有关科研人员参考。

第一图书网, tushu007.com

<<量子化学基础>>

书籍目录

前言外文-中文人名对照表第一章 量子力学基础及简单应用第一节 量子力学诞生的实验基础与基本概念的引出一、能量量子化与光的波粒二象性二、实物粒子的波动性假设与实验证实第二节 量子力学基本假设I——波函数及其意义一、第一假设——波函数二、波函数的统计解释三、不确定关系第三节 量子力学基本假设Ⅱ——Schr6dinger方程一、SchrOdinger 方程二、定态SchrOdinger方程三、定态波函数的性质第四节 量子力学基本假设Ⅲ——力学量的算符表示一、第三假设——力学量的算符表示二、IIermite算符的本征函数与本征值三、完备共同的本征函数系第五节 量子力学基本假设Ⅳ——力学量平均值第六节 量子力学基本假设V——全同性原理一、第五假设——全同性原理二、Pauli不相容原理第七节 简单应用一、一维谐振子二、隧道效应与应用习题第二章 普通原理和定理第一节 变分法一、基态变分原理二、激发态变分原理三、线性变分法四、HMO法第二节 Hellmann-Feynman定理一、微分H—F定理二、H—F静电定理三、积分H—F定理四、举例第三节 量子力学的virial定理一、含时力学量二、Euler定理三、virial定理四、virial定理对原子体系的应用五、virial定理对分子体系的应用六、virial定理与化学键第四节 幺正变换与Dirac符号一、幺正变换（酉变换）二、Dirac符号习题第三章 定态微扰方法及其应用第一节 定态非简并微扰方法一、基本方程组二、非简并的一级微扰三、氦原子基态能量的计算第二节 定态简并微扰方法第三节 微扰分子轨道法一、基本原理二、分子内微扰三、分子间微扰第四节 反应活性的微扰理论一、反应活性微扰理论的基本原理二、普遍化的微扰方程和化学反应习题第四章 角动量第一节 轨道角动量一、轨道角动量算符二、轨道角动量的对易关系三、轨道角动量算符的本征方程四、l2、l2与H相互对易五、轨道角动量与磁矩第二节 电子的自旋一、电子自旋的早期实验基础和特点二、电子自旋算符与本征值三、自旋轨道四、自旋波函数与自旋本征函数五、两个电子体系的自旋本征函数第三节 角动量耦合一、总角动量算符及其规则二、总角动量平方算符J2的本征值与总角动量z分量算符J：的本征值三、总角动量量子数j的可能取值第四节 多电子原子中的相互作用一、多电子原子中作用的分类二、电子相关能三、剩余Coulomb作用四、电子自旋一轨道相互作用第五节 原子的量子态与光谱项一、电子组态与原子量子态二、原子的各种总角动量量子数三、L-S耦合与j-j耦合四、原子光谱项习题第五章 群论简介第一节 群的定义与分子点群一、群的定义二、分子点群第二节 群的基本概念一、群的乘法表二、子群三、共轭元素与类四、同构第三节 群的表示一、矩阵二、对称操作的矩阵表示三、点群的表示四、特征标五、不可约表示的性质与可约表示的约化六、应用举例七、循环群的表示第四节 群论与量子化学一、波函数作为不可约表示的基二、投影算符三、表示直积与积分值的判断第五节 简单应用一、在HMO法中的应用二、在配位场理论中的应用习题第六章 含时微扰方法与量子跃迁第一节 含时微扰方法与跃迁概率第二节 Einstein的辐射理论第三节 电偶极跃迁周期微扰一、发生明显跃迁的频率二、体系吸收光子的情况，Amk与Bkm的计算三、体系受激发射光子的情况四、激发态的平均寿命与能级宽度第四节 选择定则与原子光谱选择定则一、选择定则概述二、原子光谱的选择定则第五节 分子光谱的选择定则一、双原子分子转动光谱的选择定则二、双原子分子振动光谱的选择定则三、电子光谱的选择定则四、Franck_（~ondon原理与双原子分子电子振动跃迁的选择定则第六节 应用群论讨论分子的电子光谱跃迁一、反一丁二烯二、甲醛习题第七章 自洽场方法第一节 原子的HF自洽场方法一、原子体系的Hartree方程及其解二、原子体系的HF方程第二节 自洽场分子轨道法一、原子单位二、分子轨道法在物理模型上的三个近似三、闭壳层分子的HF方程……第八章 电子相关第一节 电子相关作用第二节 组态、Nesbet定理和大小一致性第三节 组态相互作用第四节 多组态自洽场第五节 Mtiller-Plesset微扰法第六节 耦合簇理论第七节 几种计算相关能方法的比较习题第九章 密度泛函理论第一节 Thomas—Fermi方法第二节 Hohenberg-Kohn定理第三节 Kohn-Sham方法第四节 局域密度近似和广义梯度近似第五节 杂化方法第六节 自相互作用习题第十章 布居数分析和频率分析第一节 Mulliken布居数分析第二节 自然轨道、自然布居数分析第三节 简正坐标和频率分析第四节 热力学函数第五节 过渡态习题第十一章 量子化学的计算方法第一节 半经验法第二节 从头计算法第三节 Xa方法习题主要参考文献附录附录Ⅰ 基本物理常数附录Ⅱ能量单位换算附录Ⅲ常见对称群的特征标表

第一图书网, tushu007.com

章节摘录

第四节量子力学基本假设Ⅲ——力学量的算符表示一、第三假设——力学量的算符表示对于微观体系每个可观测的力学量对应一个线性厄米算符。

1.引入算符的说明　在经典力学宏观物体的运动状态可用位置和动量来描述，所谓状态的确定是指位置和动量同时有确定值。

经典力学的力学量，包括坐标、动量、动能、势能、角动量等都是用来描述运动状态性质的，可以表示成位置、动量的函数。

这些力学量都可以由实验测定，称为可观测的。

量子力学同样也存在力学量，除沿用经典力学的力学量外，还有一些新的力学量，如自旋角动量等。

它们都是描述微观体系运动状态性质的。

由于微观粒子的波粒二象性，粒子的位置与动量不能同时有确定值，这就使得微观粒子的运动状态不能用动量、位置来描述，而是用波函数来描写。

表示在某一时刻，发现单一粒子在空间某点的概率。

通常认为波函数包含体系的全部信息，就是说，已知任意波函数，完全可以确定该状态下测量力学量的可能值及其相应的概率。

这表明不能用经典力学方法确定力学量，量子力学确定力学量的方法是对波函数进行某种运算，不同力学量用不同的计算方法，这种运算用一种符号表示，简称为算符。

量子力学为了计算力学量而引进算符。

算符是运算符号的简称，它表示一种运算规则。

任何力学量均可用相应的算符表示，是量子力学的基本假设。

常用的力学量算符列入表1-1中。

在量子力学中，所有的力学量与相应的算符一一对应，下面将会看到这样的算符是线性厄米算符，力学量的取值由相应算符满足的本征方程的解来决定。

第一图书网, tushu007.com

<<量子化学基础>>

编辑推荐

本书介绍量子化学原理及其应用。
全书共11章。
第一章主要参考2002年以后我国出版的量子力学教材写成，反映了量子力学对某些概念的深入认识。
第二章介绍变分原理、Hellmann-Feynman定理和virial定理，考虑到后面两个定理在化学中日趋重要，因此，本书对这两个定理进行了详细介绍。
第三章主要介绍定态微扰方法及其在共轭体系和反应活性方面的应用。
第四章主要内容是轨道角动量、自旋角动量与角动量耦合，这些知识有助于认识质点在有心力场的运动、共价键的形成、原子光谱。
第五章自成一个体系，为以后的应用做准备。
第六章应用量子力学观点对光谱进行解释。
第七章分别介绍原子体系的Hartree-Fock方程和分子体系的Hartree-Fock-Roothaan方程，Hartree-Fock-Roothaan方程是进行量子化学计算的基本方程式。
以下四章都是与量子化学计算有关的内容。
第八章介绍电子相关能的计算。
第九章介绍基本原理及进行量子化学计算的方法。
第十章介绍不同类型的布居数分析、热力学函数、过渡态的计算方法。
第十一章主要介绍从头计算方法。

第一图书网, tushu007.com

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