

<<结构化学>>

图书基本信息

书名：<<结构化学>>

13位ISBN编号：9787040312034

10位ISBN编号：7040312034

出版时间：2011-6

出版时间：李炳瑞 高等教育出版社 (2011-06出版)

作者：李炳瑞

页数：695

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>

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 内容概要

《普通高等教育“十一五”国家级规划教材：结构化学（多媒体版）（第2版）》为“国家理科基地创建名牌课程项目”、“国家级精品课程建设项目”基金资助的研究成果，是国家级精品课程使用教材，也是普通高等教育“十一五”国家级规划教材（第一版为普通高等教育“十五”国家级规划教材）。

全书共12章，涵盖结构化学主要内容。

书中插图质量较高，有习题357题，大部分配有参考答案。

书后所配的光盘含1894张多媒体幻灯片和239个3D动态模型与动画，使静态教材变为动态教材，便于课堂教学和学生自习。

本教材概念定位准确，详细解释难点，原理表述清晰，思路、行文等富有逻辑性；反映学科新进展、新动态，相关史料贯穿其中；作者对结构化学教学进行了深入研究，形成了精辟而独到的见解，具有启发性。

《普通高等教育“十一五”国家级规划教材：结构化学（多媒体版）（第2版）》文字流畅，语言通俗易懂，可作为高等院校化学专业，以及材料化学、生物和药物化学专业本科生教学用书，也可供研究生或科技人员参考。

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 作者简介

李炳瑞 兰州大学物理化学教授，世界理论有机化学家协会(WATOC)会员，第40届IUPAC国际会议物理化学学术委员会委员。

从事结构化学、量子化学、计算化学等教学与科研30多年，曾在香港科技大学、巴黎第七大学、ITODYS研究所做访问学者。

主持国家级精品课程和国家理科基地名牌课程“结构化学”建设项目。

编著制作《结构化学》多媒体教材入选“十五”、“十一五”国家级规划教材，主持《高等化学教学资源库结构化学子库》建设，合译牛津大学《无机化学》，以上著作由高等教育出版社出版。

2008年参编《配位化学》。

教学工作先后获国家级教学成果一等奖、国家级教学成果二等奖、宝钢教育基金优秀教师奖、甘肃省教书育人奖、甘肃省教学成果一等奖、兰州大学教学成果一等奖等14项。

2003年被授予首届“兰州大学教学名师”，2006年被授予“甘肃省教学名师”荣誉称号，2009年入选国家级教学团队。

科研工作先后获国家科技成果证书(两次)、商业部科技进步三等奖、甘肃省科技进步三等奖。

关于纳米电子学的研究论文2008年10月被国际权威杂志Nature的Nature CHINA评为最新研究亮点。

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 量子力学基础1.1 从经典力学到早期量子论1.1.1 黑体辐射与能量量子化1.1.2 光电效应与光量子化1.1.3 原子光谱与轨道角动量量子化1.2 量子力学的建立1.2.1 实物粒子的波粒二象性1.2.2 Schrödinger方程1.2.3 波函数的概率解释1.2.4 不确定原理1.2.5 量子力学公设1.3 阱中粒子的量子特征1.3.1 一维无限深势阱中的粒子1.3.2 三维无限深势阱中的粒子1.4 隧道效应习题参考文献第2章 原子结构2.1 单电子原子的schrodinger方程及其解2.1.1 单电子原子schrodinger方程的建立2.1.2 坐标变换与变量分离2.1.3 方程的求解：原子轨道与能级2.1.4 virial定理与零点能2.2 原子轨道和电子云的图形表示2.2.1 作图对象与作图方法：三元函数的降维2.2.2 轨道和电子云的径向部分与角度部分的对画图2.2.3 轨道和电子云的等值面图与界面图：函数参数化2.2.4 轨道和电子云的网格图：坐标参数化2.2.5 电子云黑点图2.2.6 原子轨道的宇称2.3 量子数与可测物理量2.3.1 算符与可测物理量2.3.2 角动量的空间量子化2.4 多电子原子的结构2.4.1 多电子原子schrodinger方程的近似求解2.4.2 构造原理与Slater行列式2.5 原子结构参数2.5.1 电离能2.5.2 电子亲和势2.5.3 电负性2.5.4 化学硬度2.6 原子光谱项2.6.1 组态与状态2.6.2 L-S矢量耦合模型2.6.3 原光谱项和光谱支项的求法2.6.4 基谱项的确定Hund规则2.6.5 跃迁选律2.6.6 Zeeman效应习题参考文献第3章 双原子分子结构与化学键理论3.1 分子轨道理论3.1.1 H<sub>2</sub>的Schrodtinger方程与B.O.近似3.1.2 变分原理及其证明3.1.3 H<sub>2</sub>的Schrodinger方程的变分求解3.1.4 共价键的本质3.1.5 分子轨道理论要点3.1.6 分子轨道的类型3.1.7 双原子分子的价层轨道与电子组态3.2 价键理论3.2.1 H<sub>2</sub>的Schrodinger方程的变分求解3.2.2 电子配对法的量子力学基础3.2.3 原子轨道的杂化3.3 MO理论与VB理论比较3.4 双原子分子的光谱项3.4.1 分子谱项及支项3.4.2 非等价组态的谱项3.4.3 等价组态的谱项3.4.4 混合组态的谱项3.4.5 分子谱项的字称和反映对称性.....第4章 分子对称性与群论初步第5章 多原子分子的结构与性质第6章 超分子化学简介第7章 晶体的点阵结构与X射线衍射法第8章 金属晶体与离子晶体的结构第9章 新型功能材料的结构简介第10章 结构分析原理第11章 计算化学简介第12章 结构信息与QSAR

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：结构化学是研究原子、分子、固体的微观结构、运动规律，以及结构与性能关系的科学。

微观物体运动遵循的规律——量子力学，被称为20世纪三大科学发现（相对论、量子力学、DNA双螺旋结构）之一。

100多年前量子概念的诞生、随后的发展及其产生的革命性巨变，是一场激动人心又发人深省的史话。

量子力学是结构化学的理论基础，开篇就会遇到。

量子力学不但具有难以回避的、高度抽象的数学结构，而且具有极其深刻的哲学意义，以至于量子力学的一些说法显得有悖常理。

难怪量子力学创始人之一、丹麦物理学家N.Bohr说：“任何能思考量子力学而又没有被搞得头晕目眩的人都没有真正理解量子力学”。

对于缺少足够数理基础的非物理专业学生来说，初次学习结构化学，往往把量子力学基础看成是难以逾越的“势垒”。

在这部教材中，我们试图向学生表明：量子力学是结构化学的理论基础，但不是结构化学的主要内容。

至少在基础课水平上，重点是利用量子力学引出新概念（如原子轨道、分子轨道、电子云、能级、跃迁选律等），从微观角度对化学问题作出理论解释和预测，而暂时不必深入可能迷路的数学丛林。

为此，本章基本是采取“史话”方式，从量子力学发展史上具有里程碑意义的一些故事开始，逐步引出量子力学基本原理。

当然，量子力学源远流长，“剧情”起伏跌宕，这种讲授法也未必总是合适。

如果读者数理基础较好，不妨直接进入量子力学公设，反正这种认识上的“跃迁”迟早总得发生，不可能平稳过渡。

不过对多数学生，采取“史话”方式讲授，难度的“势垒”可能会降低一点，而且可以从中受到一些科学方法论的启迪。

那么，就让我们进入“剧场”吧……

## <<结构化学>>

### 编辑推荐

《结构化学(多媒体版)(第2版)》是普通高等教育“十一五”国家级规划教材之一。

<<结构化学>>

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>