第一图书网, tushu007.com

<<简明结构化学教程>>

图书基本信息

书名：<<简明结构化学教程>>

13位ISBN编号：9787122120434

10位ISBN编号：7122120430

出版时间：2011-12

出版时间：化学工业出版社

作者：夏少武

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

前言

第一图书网, tushu007.com

内容概要

本教材是《简明结构化学教程》的第三版，简明介绍了结构化学的相关理论知识，具体内容包括量子力学基础，原子的结构与性质，分子的对称性，分子轨道理论，价键理论，配合物的化学键理论，分子的物理性质及次级键，结构分析方法简介，晶体结构。
力求做到基本概念、基本理论严谨，反映科学的进展，突出重点，深入浅出，有利于读者的学习和理解。

本教材适合用作高等院校结构化学课程教材，也可供相关科研人员参考使用。

书籍目录

第一章　量子力学基础
一、量子力学产生的背景
1?黑体辐射与光电效应
2?实物粒子的波粒二象性
3?德布罗意波的统计解释
二、不确定关系
1?不确定关系的表述
2?应用
三、量子力学的基本假设
1?波函数
2?力学量的算符表示
3?量子力学的基本方程
4?平均值假设
5?泡利(Pauli)不相容原理
四、一维无限深方势阱
1?能量
2?波函数
五、基本例题解
习题
第二章　原子结构
一、类氢原子
1?类氢原子的定态薛定谔方程
2?球坐标系的分离变量法
3?三个方程的求解与量子数
4?类氢原子的波函数
二、量子数的物理意义
1?主量子数n
2?角动量与角量子数l
3?磁量子数m
三、原子轨道和电子密度图形
1?概述
2?原子轨道与电子密度径向分布
3?原子轨道角度分布与电子密度角度分布
四、多电子原子的结构
1?氦原子的薛定谔方程
2?中心力场近似
3?屏蔽效应
4?原子体系的哈特利(Hartree)自洽场方法
五、电子的自旋与自旋波函数
1?施登?盖拉赫(Stern?Gerlach)实验
2?电子自旋假设
3?自旋与自旋在磁场方向分量的表达式
4?自旋轨道与自旋波函数
六、基态原子核外电子排布的原则
1?泡利(Pauli)不相容原理

2?能量最低原理
3?洪德(Hund)规则
七、原子的量子态和光谱项
1?电子组态与原子量子态
2?原子光谱项
八、原子电离能、电子亲和能和电负性
1?原子电离能和电子亲和能的定义
2?原子的电负性
九、基本例题解
习题
第三章　分子的对称性与分子点群
一、对称操作与对称元素
1?旋转轴和旋转操作
2?镜面和反映操作
3?对称中心和反演操作
4?象转轴和旋转反映操作
二、分子点群
1?群的定义
2?对称操作群
3?群的乘法表
4?分子点群的分类
5?分子点群的判别
三、分子的偶极矩和旋光性的预测
1?分子的偶极矩
2?分子的旋光性
四、基本例题解
习题
第四章　分子轨道理论
一、氢分子离子
1?氢分子离子的薛定谔方程
2?变分法简介
3?用线性变分法求解H+2的薛定谔方程
4?变分法处理H+2所得主要结果的分析
二、简单分子轨道理论
1?简单分子轨道理论的要点
2?应用简单分子轨道理论处理H2的结果
三、分子轨道的类型、符号和能级顺序
1?类型和符号
2?能级顺序
四、双原子分子的结构和性质
1?分子的电子组态与键级
2?同核双原子分子
3?异核双原子分子
五、休克尔分子轨道法和共轭分子结构
1?休克尔分子轨道法
2?离域π键形成条件和类型
3?离域效应

4?超共轭效应
?六、前沿轨道理论与轨道对称守恒原理
1?前沿轨道理论
2?分子轨道对称守恒原理
七、基本例题解
习题
第五章　价键理论
一、海特勒?伦敦处理氢分子的结果
1?简介海特勒?伦敦法解H2分子的薛定谔方程
2?氢分子的全波函数
二、价键理论的要点及对简单分子的应用
1?价键理论的要点
2?价键理论对简单分子的应用
三、价键理论与简单分子轨道理论的比较
1?理论比较
2?实验检验
四、杂化轨道理论
1?杂化轨道理论要点
2?等性杂化轨道的主要类型
3? sp不等性杂化
*五、价电子对互斥理论(VSEPR)
1? VSEPR判断分子几何构型的规则
2?应用VSEPR分析实例
六、基本例题解
习题
第六章　配合物的化学键理论
一、概述
?二、配合物的价键理论
三、晶体场理论
1?中心离子d轨道能级的分裂
2?中心离子d电子的排布——高自旋态和低自旋态
3?晶体场稳定化能
4?姜?泰勒(John?Teller)效应
四、配合物的分子轨道理论初步
1?金属离子的原子轨道分组
2?配体的σ群轨道
3?π分子轨道
五、σ?π配键及有关配合物
1?金属羰基配合物中的σ?π配键
2? π配合物的σ?π配键
3?金属夹心配合物
六、硼烷与缺电子多中心键
1?硼烷的定义与分类
2?三中心双电子键
3?惠特规则
七、基本例题解
习题

第七章　分子的物理性质及次级键
一、分子的电学性质
1?偶极矩
2?小分子的极化
3?克劳修斯?莫索第方程与德拜方程
4?劳伦兹?劳伦茨方程
*二、分子的磁学性质
1?磁化率
2?物质的磁性分类
3?分子磁矩
4?铁磁性、反铁磁性与亚铁磁性
5?摩尔顺磁磁化率与磁矩的关系
三、分子间作用力
1?范德华力的组成
2?兰纳?琼斯(Lennard?Jones)势
3?分子间作用力对物质物理性质的影响
4?原子的范德华半径
四、次级键
1?氢键
2?其他种类的次级键
五、基本例题解
习题
第八章　结构分析方法简介
一、分子光谱
1?概述
2?吸收光谱的几种表示法
3?双原子分子的转动光谱
4?双原子分子的振动光谱
5?多原子分子的振动光谱
6?拉曼光谱简介
7?紫外?可见光谱及其应用
二、光电子能谱（PES）
1? X射线光电子能谱(XPS)
2?紫外光电子能谱(UPS)
三、基本例题解
习题
第九章　晶体结构
一、晶体结构的周期性和点阵
1?晶体的宏观通性
2?晶体结构的周期性
3?点阵
4?十四种空间点阵型式
二、晶胞、晶棱和晶面
1?晶胞和晶胞中微粒的位置
2?晶面指标
3?晶棱指标
4?点阵与晶体之间的对应关系

三、晶体的宏观对称性
1?晶体的宏观对称元素与对称操作
2?晶体的32种宏观对称类型
3?七个晶系
四、晶体的微观对称性
五、实际晶体的缺陷
1?实际晶体与理想晶体
2?实际晶体的缺陷
3?单晶体、多晶体、微晶体
六、 X射线晶体结构分析原理
1? X射线的产生
2? X射线衍射的基本原理
3?布拉格方程
4?常用X射线衍射分析方法
七、固体能带理论
1?晶体中电子的能带
2?绝缘体、导体、半导体
3?半导体的能带结构
八、等径圆球的密堆积与最密堆积空隙
1?等径圆球的密堆积
2?最密堆积空隙
九、金属晶体
1?金属键
2?单质金属晶体的结构和金属原子半径
十、离子晶体结构
1?离子晶体的几种典型的结构型式
2?点阵能的计算
3?离子半径
十一、离子晶体结构的鲍林(Pauling)规则与离子晶体举例
1?鲍林规则
2?离子晶体举例——尖晶石结构
十二、共价晶体与分子晶体
1?共价晶体
2?分子晶体
十三、基本例题解
习题
附录1
附录2参考习题答案
附录3索引
参考文献

章节摘录

版权页：插图：前几章介绍了原子、分子的性质。
然而通常物质不是以单个原子或分子状态存在，而是以大量原子、分子的聚集状态——气体、液体、固体等状态存在。
固体物质可以分为晶体和无定形体两大类。
无定形体如玻璃、松香等，其分子像液体那样不规则地排列着，可以看做过冷状态的液体。
自然界的固体物质中，绝大多数是晶体，因此对晶体的研究是非常重要的。
常见的晶体有食盐、水晶（透明的二氧化硅晶体）等。
晶体中的微粒（原子、离子、分子等）在空间有规律地排列着，晶体的许多特性都和微粒排列的规律性即结构周期性有关。
为了深入认识晶体结构的周期性将其抽象为点阵，不同的晶体可能有不同的点阵结构，点阵是从几何角度研究晶体结构的周期性。
基于晶体结构的周期性，晶体具有对称性。
晶体的规则外形呈现出宏观对称性；晶体的点阵结构呈现出微观对称性。
大量微观粒子（原子、离子、分子）紧密地有规则地结合成晶体的原因是微粒之间存在一定的相互作用，这些相互作用决定了微粒的堆积方式与晶体的结构。
微粒的堆积方式可分为等径圆球堆积和不等径圆球堆积。
由微粒间的相互作用，可分为共价键、离子键、金属键以及次级键。
根据晶体结合键型的不同，可分为金属晶体、离子晶体、共价晶体、分子晶体和次级键晶体等。
如果把晶体看做一个大分子，由于晶体具有结构周期性，使晶体中电子的运动受到限制，只有晶体的价电子才有可能不再束缚于个别原子，在晶体中共有化运动。
采1.晶体的宏观通性（1）具有确定的熔点将晶体加热只有达到一定温度才开始熔化，直到晶体全部熔化后温度才开始上升，这个温度就是熔点。
非晶体如玻璃，随着温度升高逐渐变软，进而变成流动性较高的液体，没有固定的熔点。
晶体与非晶体这种差别是由于晶体具有结构周期性决定的。
因为晶体各部分按同一方式排列，使得构成晶体的微粒间有一定的结合能，当温度升高到微粒的热运动达到结合能时晶体开始熔融，故有一定的熔点。
非晶体由于无结构周期性，因此无固定熔点。
（2）各向异性与均匀性晶体的某些物理性质与方向有关，如电导率、折射率、机械强度等，在不同的方向上具有不同的值。
仅以石墨的电导率为例，在与层平行方向上的数值约为层垂直方向上的104倍。
晶体的这种特性称为各向异性。
但是晶体也有一些物理性质与方向无关。
例如密度在各个方向都相同，晶体的这种性质称为均匀性。
晶体的各向异性和均匀性，都取决于晶体结构的周期性，由于使不同方向上微粒的排列方式不同，在宏观上表现为各向异性。
但与方向无关的物理量的测定是统计平均结果，在宏观E表现为均匀性。

编辑推荐

《简明结构化学教程(第3版)》为高等学校教材之一。

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