

<<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：9787122127679

10位ISBN编号：7122127672

出版时间：2012-2

出版时间：化学工业出版社

作者：杨照地，孙苗，苑丹丹 编

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;量子化学基础&gt;&gt;

## 前言

量子化学是一门理论基础课。

由于理论性很强，很抽象，很多学校都删减了这门课或缩短了学时。

但是对于打算深造的一些本科拔尖学生和硕士研究生，这门课对于他们将来的科研工作是必不可少的。

一直以来，我们坚持对研究生进行量子化学基础必修课教学和本科生的选修课教学。

为了能够提高教学效果，我们集合多本量子化学相关教材的优点，结合编者多年的教学经验和科研经验，对量子化学方向的基础知识进行了整合，在更加突出基础知识的同时，加入了目前计算化学中常用的密度泛函理论和分子模拟，并增加了量子化学计算实验即第11章“量子化学应用实例”，这些以量子化学为基础的计算化学实验引入，突破了传统的教学模式，能有效增加学生的学习兴趣，对提高学习效果很有帮助。

本书共分11章，内容包括量子力学基础、简单体系的量子力学精确解、电子自旋和Pauli原理、近似方法、分子点群与群论初步、原子光谱项和双原子分子光谱项、自洽场分子轨道理论、价键理论、密度泛函理论、分子模拟和量子化学应用实例。

其中每一章都配有课后思考题和习题。

本书分工如下：第1、4、6、9、11章，以及前言和附录由杨照地（哈尔滨理工大学）编写；第2、7、8、10章由孙苗（哈尔滨理工大学）编写；第3、5章由苑丹丹（东北石油大学）编写；张桂玲教授对本书进行了统稿和主审。

在编写过程中还得到了刘波教授和张辉教授多方面的支持和指导，在此一并表示感谢。

限于编者的水平，书中难免有一些疏漏不当之处，诚挚希望读者指正，以便再版时得以更正。

编者2011年8月

## <<量子化学基础>>

### 内容概要

本书共分十一章，内容包括量子力学基础、简单体系的量子力学精确解、电子自旋和Pauli原理、近似方法、分子点群与群论初步、原子光谱项和双原子分子光谱项、自洽场分子轨道理论、价键理论、密度泛函理论、分子模拟、量子化学应用实例。

本书是作者从事量子化学教学和科研工作的总结，可作为综合性大学、高等师范院校化学专业硕士研究生必修课或本科生选修课教学用书，也可作为其他专业研究生的选修课用书或供从事相关专业的科技人员参考。

## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

## 书籍目录

## 第1章量子力学基础

## 1.1量子论的诞生

## 1.1.1黑体辐射——Planck的量子假说

## 1.1.2光电效应——Einstein的光子学说

## 1.1.3氢原子光谱——Bohr的原子结构理论

## 1.2实物粒子的波粒二象性和不确定关系

## 1.2.1de Broglie波

## 1.2.2de Broglie波的统计解释

## 1.2.3不确定关系

## 1.3波函数与Schr.dinger方程

## 1.3.1波函数

## 1.3.2Schr.dinger方程

## 1.4算符及其性质

## 1.4.1算符的概念

## 1.4.2算符代数及对易

## 1.4.3线性算符

## 1.4.4Hermite算符

## 1.5本征函数的性质

## 1.5.1本征方程和本征函数

## 1.5.2Hermite算符本征函数的本征值

## 1.5.3简并本征函数的线性组合和态叠加原理

## 1.5.4Hermite算符非简并本征函数的正交性

## 1.5.5同一Hermite算符简并本征函数的正交化

## 1.5.6Hermite算符本征函数的完备性

## 1.5.7任意函数向正交归一函数集合的展开

## 1.5.8平均值

## 1.6对易算符的本征函数

## 1.6.1算符对易定理

## 1.6.2矩阵元定理

## 1.7算符和力学量

## 1.7.1算符化规则

## 1.7.2不同力学量同时有确定值的条件

## 1.7.3动量和坐标算符的对易规则

## 1.8宇称算符和宇称性

## 1.9量子力学公设

## 1.10角动量

## 1.10.1角动量的经典力学表示

## 1.10.2角动量算符表示式

## 1.10.3角动量算符的对易关系

## 思考题

## 习题

## 第2章简单体系的量子力学精确解

## 2.1一维空间中的自由质点

## 2.2一维势箱中运动的质点

## 2.3变量分离与三维势箱中运动的质点

## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

2.4一维谐振子

2.5中心力

2.6刚性转子

2.7氢原子和类氢离子

2.7.1单电子体系的定态Schr.dinger方程

2.7.2 方程解

2.7.3 方程解

2.7.4R(r)方程解

2.7.5单电子原子的波函数

2.7.6量子数的物理意义

2.7.7氢原子基态的电子云图示

2.7.8氢原子的波函数图形

2.8氢分子离子的精确解

思考题

习题

第3章电子自旋和Pauli原理

3.1电子自旋

3.2Pauli原理

3.2.1全同粒子

3.2.2对称函数和反对称函数

3.2.3从非对称函数构成对称和反对称函数

3.2.4Pauli原理

3.3Slater行列式

思考题

习题

第4章近似方法

4.1变分法

4.1.1最低能量原理

4.1.2变分法

4.1.3变分法的扩展

4.1.4线性变分法

4.2定态微扰理论

4.2.1非简并能级的微扰理论

4.2.2简并能级的微扰理论

4.3H+2基态的变分法与微扰法处理比较

4.3.1变分法

4.3.2微扰法

思考题

习题

第5章分子点群与群论初步

5.1群的概念

5.1.1群的定义

5.1.2相似变换、共轭元素和类

5.1.3群的乘法表

5.2对称操作与对称元素

5.3对称点群

5.4矩阵表示和特征标

## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

## 5.5可约表示与不可约表示

## 5.5.1可约表示

## 5.5.2不可约表示

## 5.5.3可约表示的约化

## 5.6特征标表

## 5.7直积表示的特征标

## 5.8群论与量子力学

## 5.8.1波函数作为不可约表示的基

## 5.8.2投影算符与分子轨道

## 5.8.3矩阵元的计算

## 5.8.4杂化轨道

## 思考题

## 习题

## 第6章原子光谱项和双原子分子光谱项

## 6.1原子光谱项

## 6.1.1原子的电子组态

## 6.1.2原子的量子数和角动量的耦合

## 6.1.3原子光谱项

## 6.1.4原子光谱项对应能级的相对大小

## 6.1.5原子能级和原子光谱的关系

## 6.1.6原子光谱项的推求

## 6.2双原子分子光谱项

## 6.2.1同核双原子分子的电子组态

## 6.2.2分子的电子谱项

## 6.2.3谱项波函数

## 6.2.4实例

## 6.2.5光谱支项

## 思考题

## 习题

## 第7章自洽场分子轨道理论

## 7.1电子态计算中的基本近似

## 7.1.1非相对论的分子Hamilton量

## 7.1.2Born.Oppenheimer近似

## 7.1.3轨道近似

## 7.2闭壳层分子的能量表达式

## 7.3分子轨道的自洽场理论

## 7.3.1Coulomb算符和交换算符

## 7.3.2Hartree.Fock方程

## 7.3.3Roothann方程

## 7.4开壳层分子

## 7.5从头算方法

## 7.6分子轨道中的系数和集居数分析

## 7.7离域分子轨道和定域分子轨道

## 7.7.1甲烷的离域分子轨道

## 7.7.2甲烷的定域分子轨道

## 7.7.3定域MO与离域MO的关系

## 7.8电子相关与组态相互作用

## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

思考题

习题

第8章价键理论

8.1氢分子的VB法处理

8.2VB法与MO法的比较

8.2.1MO法所得氢分子基态波函数

8.2.2VB法所得氢分子基态波函数

8.2.3分子的VB波函数与MO波函数的写法

8.3多原子分子的VB法处理

8.3.1价键结构和共振

8.3.2四个单电子原子组成的分子ABCD

8.3.3参量化

8.4水分子的VB处理

8.5共振能

思考题

习题

第9章密度泛函理论

9.1Thomas.Fermi模型

9.2Hohenberg.Kohn定理

9.3Kohn.Sham方法

9.4HF方法与DFT方法的能量比较

9.5含时密度泛函理论

思考题

习题

第10章分子模拟

10.1力场

10.1.1力场作用项的一般式

10.1.2比较常见的力场

10.2分子力学

10.2.1分子力学的算法

10.2.2优化中要注意的几点问题

10.2.3分子力学的应用

10.3分子动力学

10.3.1积分方法

10.3.2初始化

10.3.3粒子受力的计算

10.3.4分子动力学的应用

思考题

习题

第11章量子化学应用实例

11.1Gaussian运行指南：输入和输出

11.1.1Gaussian03输入文件

11.1.2分子几何的输入

11.1.3关键词(Key Words)

11.1.4输出文件

11.2单点能的计算

11.2.1甲醛单点能的计算

## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

- 11.2.2预测甲烷分子的NMR屏蔽常数
- 11.3几何优化
- 11.4频率计算
- 11.5激发态
  - 11.5.1 CIS方法及乙烯激发态的计算
  - 11.5.2 甲醛激发态的优化和频率计算
  - 11.5.3 TD方法
- 11.6模拟化学反应
  - 11.6.1过渡态的优化
  - 11.6.2 IRC计算
- 11.7模拟溶液中的体系
  - 11.7.1溶液中二氯乙烷不同构象间的能量差
  - 11.7.2乙腈溶液中的甲醛振动频率
- 11.8 QM/MM方法——ONIOM计算和应用
- 习题
- 附录
  - 附录 一些基本的物理常数
  - 附录 特征标表
  - 附录 二阶线性常微分方程
  - 附录  $\hat{L}^2$ 算符的球极坐标变换
- 参考文献



## &lt;&lt;量子化学基础&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：虽然分子力学的思想和方法在20世纪40年代就建立起来了，但是直到50年代以后，随着电子计算机的发展，用分子力学来确定和理解分子的结构和性质的研究才越来越多。

直到这时，才可以说分子力学已成为结构化学研究的重要方法之一。

近几年来，随着现代技术的发展和应用，特别是计算机技术的发展，分子力学方法已不仅能处理一般的中小分子，也不仅主要应用于有机化学领域，而且能处理大分子体系。

在其它的一些领域，如生物化学、药物设计、配位化学中，都有了广泛的应用。

分子力学最重要的用处是根据适合的力场计算分子各种可能构象的势能。

势能越低，构象越稳定，在系统中出现的几率越大；反之，势能越高，构象越不稳定，在系统中出现的几率越小。

其中，最重要的是找出分子势能最低的构象，即最稳定的构象。

寻找势能最低点的过程为能量最小化。

利用能量最小化方法所得到的构象称为几何优选构象。

对复杂的分子而言，由能量最小化方法所得到的几何优选构象并非一定是能量最低的构象，必须仔细的检查方可确认。

<<量子化学基础>>

编辑推荐

《量子化学基础》为高等学校教材之一。

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>