

<<量子化学>>

图书基本信息

书名：<<量子化学>>

13位ISBN编号：9787562823254

10位ISBN编号：7562823251

出版时间：2008-8

出版时间：华东理工大学出版社

作者：陈光巨，黄元河 编

页数：371

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&gt;&gt;

## 前言

20世纪20年代中期建立的量子力学,可视为物理学乃至自然科学的最重要的成就之一。紧接其后Heitler和London用量子力学方法对氢分子的成功处理,则可视为量子化学的诞生。至今的八十余年,量子化学走过了从被传统化学家排斥、疑惑,到半信半疑、以至姑妄信之,直到今天的精确的量子化学计算结果被实验化学家奉为圭臬的曲折而又不乏光彩的难忘历程。今天的量子化学,结合使用高速发展的计算机的软硬件而衍生的计算化学,已成了化学中极为重要的学科之一。

量子化学家在书斋、在计算机房、在头脑中、在计算机屏幕上,结合实验化学家的丰富的实验结果和精确测量,构思、设计着新的化学实验和新分子,探索着微观世界的无穷奥秘。

“不会摇瓶子的就不能被称为化学家”的话再也不会被人提起了。

不但化学本身,量子化学的原理和方法在相关的学科,如生命科学、材料科学、石油工业、药物设计等领域也发挥着愈来愈重要的作用。

作为一门基础性的并有丰富应用前景的学科,量子化学已成为一门化学和有关学科的研究生必须完成的基础课程。

我自1978年起即为改革开放后的第一届研究生开设并讲授“基础量子化学”课程,其后一代代的“老”研究生走上教学研究岗位,薪尽火传,为新进的研究生讲授同一课程。

我们数代师生切磋磨砺,对讲课的内容与素材精益求精,至今恰好走过了三十年。

感谢华东理工大学出版社青眼有加,约我们将多年讲课的内容整理出版,并列入“十一五”国家重点图书的出版规划,由陈光巨、黄元河和其他几位我早年的学生一起编著,这才有了这本书。

这是一本适合于研究生的基础量子化学课程的教材,也可作为大学本科高年级学生学习量子化学的参考书。

本书除了包含基础量子化学的内容外,还特色性地设计了计算化学和固体量子化学章节,以将量子化学基础知识用于实践的演练。

我热切地期盼这本书能早日出版,相信能对老师和学生的教学与科研有所帮助并为之喜欢。

为此,我为本书作序并真诚地向读者推荐。

## &lt;&lt;量子化学&gt;&gt;

## 内容概要

量子化学是理论化学的一个分支学科，是近代化学的理论基础。它是20世纪初发展起来的量子力学与化学结合用以研究化学问题的一门基础科学。量子化学理论和方法的不断发展，以及在高速电子计算机的应用，使得它不但能够探索并预言物质的结构和功能，而且已经有可能按照需求设计具有特定性能的化学物质，从而为“分子设计”及“分子工程”奠定了基础。

作为一门基础性的并有丰富应用前景的学科，量子化学已成为一门化学和有关学科的研究生必须完成的基础课程。

经过数代师生切磋磨砺，对讲课的内容与素材精益求精的追求，才有了这本书。

这是一本适合于研究生的基础量子化学课程的教材，也可作为大学本科高年级学生学习量子化学的参考书。

本书除了包含基础量子化学的内容外，还特色性地设计了计算化学和固体量子化学章节，以将量子化学基础知识用于实践的演练。

## 作者简介

陈光巨教授，北京师范大学博士生导师；主要从事化学反应机理、分子间弱相互作用和结构分子生物学等方面的研究工作；主持和参加过国家级、省部级二十余项教学和科研项目；曾获国家级教学成果奖二等奖、北京市普通高校教学成果奖一等奖和二等奖、国家教委科技进步奖三等奖；曾编写《材料化学》《结构化学》《结构化学（晶体部分）CAI软件》等教材；发表学术论文八十余篇，其中SCI收录近五十篇。

黄元河教授，北京师范大学博士生导师；主要从事大分子和低维聚合物结构与性能关系的理论研究，探讨有机和有机金属夹心高聚物、低维晶体，富勒烯体系的一维和二维聚合物及碳纳米管，富勒烯笼构成的低聚物等的结构与性能关系，应用理论化学和凝聚态物理方法研究这些体系的电子结构、稳定性的结构特征、相互作用本质、金属-绝缘体相变、导电机理和超导可能性；曾获北京市普通高校教学成果奖二等奖；发表科研论文近八十篇，其中SCI收录五十余篇。

## 书籍目录

- 第1章 算符代数和量子力学基本原理1.1 算符1.1.1 基本概念1.1.2 线性算符与Hermite算符1.2 Schrodinger方程1.2.1 状态函数和概率1.2.2 Schrodinger方程1.2.3 原子单位和Dirac符号1.3 力学量算符1.3.1 算符与量子力学1.3.2 态的叠加原理1.3.3 不同力学量同时有确定值的条件1.4 量子力学基本假设1.4.1 假设 ——波函数和概率1.4.2 假设 ——力学量与线性Hermite算符1.4.3 假设 ——力学量的本征函数和本征值1.4.4 假设 ——状态随时间变化的Schrodinger方程1.4.5 假设 ——全同性原理与Pauli原理思考题第2章 简单体系的Schrodinger方程及其解2.1 一维谐振子2.1.1 谐振子遵从Hooke定律2.1.2 谐振子的Schrodinger方程及其解2.1.3 谐振子的波函数的性质2.1.4 谐振子解释双原子分子的红外光谱2.2 角动量2.2.1 单粒子体系的角动量2.2.2 角动量的阶梯算符法2.3 类氢离子2.3.1 中心力场问题2.3.2 双粒子问题约化为单粒子问题2.3.3 类氢离子的Schrodinger方程的解2.3.4 类氢轨道2.4 特殊算符的本征函数和本征值2.4.1 宇称算符2.4.2 位置的本征函数思考题第3章 量子力学中的两种近似方法——变分法和微扰法3.1 变分法3.1.1 变分原理与变分法3.1.2 线性变分函数与线性变分法3.1.3 氢原子基态的变分处理3.2 微扰理论3.2.1 微扰的概念3.2.2 非简并能级的微扰理论3.2.3 简并能级的微扰理论3.2.4 氢原子基态的微扰处理思考题第4章 多电子原子结构4.1 电子自旋、Pauli原理和Hund规则4.1.1 电子自旋4.1.2 Pauli原理、Hund规则和核外电子的排布4.1.3 Slater行列式4.2 氢原子和锂原子的处理4.2.1 氢原子和锂原子的微扰处理4.2.2 基态氢原子和锂原子的变分处理4.3 Hartree-Fock自洽场方法4.3.1 多电子体系的Hamiltonian算符和方程4.3.2 能量表示式4.4 电子相关、组态与谱项、自旋与轨道作用4.4.1 电子相关4.4.2 组态与谱项4.4.3 自旋与轨道作用思考题第5章 群论基础和化学应用5.1 群论的基础知识5.1.1 群的定义和群的乘法表5.1.2 子群5.1.3 类5.2 分子对称性和对称点群5.2.1 对称元素和对称操作5.2.2 分子对称性5.2.3 对称操作的乘积和互易5.2.4 对称点群5.2.5 各种分子点群5.2.6 分子所属点群的系统判别方法5.3 群表示理论5.3.1 与对称操作对应的矩阵5.3.2 同构和同态5.3.3 群的矩阵表示5.3.4 等价和可约表示5.3.5 不可约表示和特征标表5.4 群论在化学中的应用5.4.1 群论与量子力学5.4.2 群论与分子轨道理论5.4.3 群论与分子振动思考题第6章 双原子分子结构6.1 Born-Oppenheimer近似6.2 双原子分子中的核运动6.3 氢分子离子的量子力学精确解和近似解6.3.1 H<sub>2</sub><sup>+</sup>的精确解6.3.2 H<sub>2</sub><sup>+</sup>的近似解6.4 H<sub>2</sub><sup>+</sup>的激发态的分子轨道6.5 双原子分子的分子轨道法6.6 双原子分子的价键法6.6.1 氢分子的价键法及其与分子轨道法的对比6.6.2 双原子分子的分子轨道和价键波函数6.7 基本定理6.7.1 Virial定理6.7.2 Hellmann-Feynman定理6.7.3 静电定理思考题第7章 多原子分子结构7.1 多原子分子电子结构7.1.1 多原子分子的分子轨道法7.1.2 多原子分子的电子组态和谱项7.2 多原子分子的自洽场分子轨道法处理7.2.1 LCAO-MO近似7.2.2 闭壳层的Hartree-Fock-Roothaan方程7.2.3 水分子的自洽场分子轨道理论处理7.2.4 开壳层的Hartree-Fock-Roothaan方程7.2.5 离域分子轨道和定域分子轨道7.3 多原子分子的价键理论处理7.3.1 水分子的价键理论处理7.3.2 原子价态7.3.3 价键理论的进展思考题第8章 计算化学简介8.1 量子化学从头算 (ab initio) 方法8.1.1 从头算计算的自洽场方程8.1.2 从头算方法中的基组8.1.3 能量梯度和平衡几何构型优化8.2 半经验分子轨道方法8.2.1 半经验分子轨道方法近似的理论推演8.2.2 当代半经验分子轨道方法成功的基础8.2.3 当代半经验分子轨道方法的最新进展8.3 密度泛函理论8.3.1 Hohenberg-Kohn定理8.3.2 Kohn-Sham方法8.3.3 几个DFT计算方法中处理交换-相关项的近似方案8.3.4 DFT的计算和运行8.3.5 TDDFT简介8.4 电子相关的计算方法简介8.4.1 电子相关和相关能计算8.4.2 组态相互作用 (CI) 方法8.4.3 多组态自洽场 (MCSCF) 方法8.4.4 微扰理论 (MP) 8.4.5 耦合簇 (CC) 方法8.5 溶剂化效应8.5.1 PCM方法8.5.2 基于半经验半经验分子轨道的SMx方法8.6 相对论量子化学8.6.1 Dirac方程8.6.2 多粒子体系的微扰处理8.6.3 直接求解Dirac方程8.6.4 相对论密度泛函理论8.7 大型量子化学计算程序的使用8.7.1 关于量子化学计算程序8.7.2 Gaussian程序使用：分子结构优化与性质计算8.7.3 Gaussian程序使用：过渡态计算8.7.4 综合算例：2-亚氨基丁烷稳定构象及其异构化研究思考题第9章 基础固体量子理论简介9.1 引言9.2 周期场的电子状态9.2.1 倒格子空间 (空间) 和Brillouin区9.2.2 Bloch定理9.2.3 周期性势场的电子运动9.2.4 几个重要的概念9.3 周期性场的晶体轨道法处理9.3.1 原子轨道线性组合晶体轨道 (LCAO-MO) 9.3.2 一些典型体系的简单晶体轨道法处理9.3.3 自洽场晶体轨道法简介9.4 一

维导体的金属—绝缘体相变 (Peierls相变) 思考题参考文献附录1 笛卡儿坐标与球坐标之间的变换关系附录2 积分表附录3 特征标表

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>