

<<结构化学>>

图书基本信息

书名：<<结构化学>>

13位ISBN编号：9787030337023

10位ISBN编号：7030337026

出版时间：2012-3

出版时间：科学出版社

作者：夏少武，夏树伟 著

页数：368

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>

<<结构化学>>

内容概要

《普通高等教育“十二五”规划教材：结构化学》共十一章，包括量子力学基础、原子的结构与性质、分子对称性、分子轨道理论、价键理论、配合物的化学键理论、簇合物和团簇、分子的物理性质及次级键、结构分析方法简介、晶体结构、晶体的结构与功能材料。

《普通高等教育“十二五”规划教材：结构化学》以化学键理论、结构与性质的关系、结构的测定方法为主线编写，反映当代结构化学新的研究进展和发展趋势。

加强应用，在介绍基本概念和基本理论的同时注重介绍应用，并简要通俗地介绍当前理论研究的前沿成果，扩大学生视野，培养学生深入探讨的好奇心。

<<结构化学>>

书籍目录

前言

第一章 量子力学基础

第一节 量子力学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
- 三、德布罗意波的统计解释

第二节 不确定关系

- 一、不确定关系的表述
- 二、应用

第三节 量子力学的基本假设

- 一、波函数
- 二、力学量的算符表示
- 三、量子力学的基本方程
- 四、平均值假设
- 五、全同性原理

第四节 金属中自由电子的运动与能量量子化

- 一、能量
- 二、波函数

*第五节 关于量子力学基本理论的争论

第六节 基本例题解

习题

第二章 原子的结构和性质

第一节 类氢原子体系的薛定谔方程及解

- 一、类氢原子体系的薛定谔方程
- 二、分离变量法
- 三、三个方程的求解与量子数
- 四、类氢原子的波函数

第二节 量子数的物理意义

- 一、主量子数 n
- 二、角动量与角量子数 l
- 三、磁量子数 m

第三节 原子轨道和电子密度图形

- 一、概述
- 二、原子轨道与电子密度径向分布
- 三、原子轨道角度分布与电子密度角度分布

第四节 多电子原子

- 一、氦原子的薛定谔方程
- 二、中心力场近似
- 三、屏蔽效应和钻穿效应
- 四、原子体系的哈特里自洽场方法

第五节 电子的自旋与自旋波函数

- 一、斯特恩-格拉赫实验
- 二、乌仑贝克-古德斯米特电子自旋假设
- 三、自旋与自旋在磁场方向分量的表达式
- 四、自旋轨道与自旋波函数

<<结构化学>>

第六节 基态原子核外电子排布的原则

- 一、泡利不相容原理
- 二、能量最低原理
- 三、洪德规则

第七节 原子的量子态和光谱项

- *一、多电子原子相互作用的分类
- 二、电子组态与原子量子态
- 三、原子光谱项

第八节 原子电离能、电子亲和能和电负性

- 一、原子电离能和电子亲和能的定义
- 二、原子的电负性

*第九节 关于价电子的讨论

- 一、电子在原子核周围有一个相对较大的活动空间
- 二、库仑力是决定原子结构的主要作用力
- 三、价电子层
- 四、价电子的重要性

第十节 基本例题解

习题

第三章 分子的对称性

第一节 对称操作与对称元素

- 一、旋转轴和旋转操作
- 二、镜面和反映操作
- 三、对称中心和反演操作
- 四、象转轴和旋转反映操作

第二节 分子点群

- 一、群的数学定义
- 二、对称操作群
- 三、群的乘法表
- 四、分子点群的分类
- 五、分子点群的判别

第三节 分子的对称性和分子偶极矩、旋光性的预测

- 一、分子的偶极矩
- 二、分子的旋光性

*第四节 群的表示初步

- 一、对称操作的矩阵表示
- 二、点群的表示
- 三、特征标

*第五节 浅谈对称性

- 一、晶体学与群论
- 二、对称性与守恒定律
- 三、全同多粒子体系交换对称性对波函数的限制
- 四、分子轨道对称守恒原理
- 五、未来的发展

第六节 基本例题解

习题

第四章 分子轨道理论

第一节 氢分子离子与变分法

<<结构化学>>

- 一、氢分子离子的薛定谔方程
- 二、原子单位
- 三、变分法简介
- 四、用线性变分法求解H₂的薛定谔方程
- 五、变分法处理H₂所得主要结果的分析
- 第二节 简单分子轨道理论
 - 一、简单分子轨道理论的要点
 - 二、应用简单分子轨道理论处理H₂的结果
- 第三节 分子轨道的类型、符号和能级顺序
 - 一、类型和符号
 - 二、能级顺序
- 第四节 双原子分子的结构和性质
 - 一、分子的电子组态与键级
 - 二、同核双原子分子
 - 三、异核双原子分子
- 第五节 休克尔分子轨道法和共轭分子结构
 - 一、休克尔分子轨道法
 - 二、离域键形成条件和类型
 - 三、离域效应
 - 四、超共轭效应
- 第六节 前沿轨道理论与分子轨道对称守恒原理
 - 一、前沿轨道理论
 - 二、分子轨道对称守恒原理
- *第七节 当前分子轨道理论概况
 - 一、哈特里-福克-罗汤方程
 - 二、计算方法
- 第八节 基本例题解
习题
- 第五章 价键理论
 - 第一节 海特勒-伦敦处理氢分子的结果
 - 一、海特勒-伦敦法解H₂分子结构简介
 - 二、海特勒-伦敦法对氢分子形成共价键的认识
 - 第二节 价键理论的要点及对简单分子的应用
 - 一、价键理论的要点
 - 二、价键理论对简单分子的应用
 - 第三节 价键理论与简单分子轨道理论比较
 - 一、理论比较
 - 二、实验检验
 - 第四节 杂化轨道理论
 - 一、杂化轨道理论要点
 - 二、等性杂化轨道的主要类型
 - 三、sp不等性杂化
 - *第五节 价电子对互斥理论
 - 一、VSEPR判断分子几何构型的规则
 - 二、应用VSEPR分析实例
 - *第六节 价键理论的发展
 - 一、价键理论的早期工作

<<结构化学>>

二、广义价键理论

三、价键理论的新进展

第七节 基本例题解

习题

第六章 配合物的化学键理论

第一节 概述

*第二节 配合物的价键理论

第三节 晶体场理论

一、中心离子d轨道能级的分裂

二、中心离子d电子的排布——高自旋态和低自旋态

三、晶体场稳定化能

四、扬特勒效应

*第四节 配体场理论简介

一、d¹轨道能级在O_h场中的分裂

二、d^N原子谱项在配体场中的分裂

第五节 配合物的分子轨道理论初步

一、金属离子的原子轨道分组

二、配体的群轨道

三、分子轨道

第六节 π -配键及有关配合物

一、金属羰基配合物中的 π -配键

二、配合物的 π -配键

三、金属夹心配合物

*第七节 配合物化学键理论简述

一、价键理论

二、晶体场理论

三、配体场理论

四、分子轨道理论

第八节 基本例题解

习题

第七章 簇合物和团簇

第一节 主族簇合物

一、硼烷

二、多面体碳烷

第二节 过渡金属簇合物

一、金属簇合物中的M—M键及其特征

二、簇合物的十八电子规则和金属-金属键的键数

三、过渡金属簇合物的分类

第三节 团簇

一、概述

二、几种团簇介绍

第四节 簇合物的催化作用

一、金属簇催化

二、团簇催化

第五节 基本例题解

习题

第八章 分子的物理性质及次级键

<<结构化学>>

第一节 分子的电学性质

- 一、偶极矩
- 二、小分子的极化
- 三、极化率与电容率的关系
- 四、极化作用与频率的关系

*第二节 分子的磁学性质

- 一、磁化率
- 二、物质的磁性分类
- 三、分子磁矩
- 四、铁磁性、反铁磁性与亚铁磁性
- 五、摩尔顺磁磁化率与磁矩的关系

第三节 分子间作用力

- 一、范德华力的组成
- 二、兰纳-琼斯势
- 三、分子间作用力对物质物理性质的影响
- 四、原子的范德华半径与分子的大小和形状

第四节 次级键

- 一、氢键
- *二、非金属原子间的次级键
- *三、金属原子间的次级键
- 四、分子间配键

第五节 基本例题解

习题

第九章 结构分析方法简介

第一节 分子光谱

- 一、概述
- 二、吸收光谱
- 三、双原子分子的转动光谱
- 四、双原子分子的振动光谱
- 五、双原子分子的振动-转动光谱
- 六、多原子分子的振动光谱
- 七、红外光谱
- 八、拉曼光谱简介
- 九、紫外-可见光谱及其应用

第二节 光电子能谱

- 一、X射线光电子能谱
- 二、紫外光电子能谱

第三节 核磁共振

- 一、核自旋
- 二、核磁共振
- 三、化学位移
- 四、核磁共振谱示例

第四节 基本例题解

习题

第十章 晶体的对称性与X射线衍射法

第一节 晶体结构的周期性和点阵

- 一、晶体的宏观通性

<<结构化学>>

- 二、晶体结构的周期性
- 三、点阵
- 四、14种空间点阵型式
- 第二节 晶胞、晶棱和晶面
 - 一、晶胞和晶胞中微粒的位置
 - 二、晶面指标
 - 三、晶棱指标
 - 四、点阵与晶体之间的对应关系
- 第三节 晶体的宏观对称性
 - 一、晶体的宏观对称元素与对称操作
 - 二、晶体的32种宏观对称类型
 - 三、七个晶系
- 第四节 晶体的微观对称性
 - 一、平移轴与平移操作
 - 二、螺旋轴与螺旋旋转操作
 - 三、滑移面与滑移反映操作
- 第五节 实际晶体的缺陷
 - 一、实际晶体与理想晶体
 - 二、实际晶体缺陷的种类
 - 三、单晶体、多晶体和微晶体
- 第六节 X射线晶体结构分析原理
 - 一、X射线的产生
 - 二、X射线衍射的基本原理
 - 三、晶体衍射方程
 - 四、X射线的衍射强度
 - 五、系统消光
 - 六、常用X射线衍射分析方法
- 第七节 基本例题解
习题
- 第十一章 晶体结构与功能材料
 - 第一节 固体能带理论
 - 一、晶体中电子的波函数
 - 二、能带理论的基本原理与能带的种类
 - *三、能带理论的导出
 - 四、绝缘体、导体和半导体
 - 五、半导体的能带结构
 - 第二节 等径圆球的密堆积与最密堆积空隙
 - 一、等径圆球密堆积
 - 二、最密堆积空隙
 - 第三节 金属晶体
 - 一、金属键
 - 二、单质金属晶体的结构和金属原子半径
 - 三、合金的结构及性质
 - 第四节 离子晶体
 - 一、离子晶体的几种典型的结构形式
 - 二、点阵能的计算
 - 三、离子半径

<<结构化学>>

四、不等径圆球的堆积与多面体空隙

五、离子堆积规律

六、离子的极化

第五节 离子晶体结构的鲍林规则与离子晶体举例

一、鲍林规则

二、离子晶体举例——尖晶石结构

第六节 共价晶体与分子晶体

一、共价晶体

二、分子晶体

*第七节 功能材料晶体

一、超导材料

二、磁性材料

三、有机非线性光学材料

四、液晶高分子材料

第八节 基本例题解

习题

部分习题参考答案

主要参考文献

附录

附录1 基本常数

附录2 能量单位换算

<<结构化学>>

章节摘录

版权页:第一章 量子力学基础结构化学是研究原子、分子和晶体的微观结构, 阐述分子和晶体的成因; 研究结构与性能之间的关系; 以及测定分子和晶体结构实验方法的学科。

因此结构化学是化学各学科、各专业的重要基础理论课程。

量子力学是研究微观粒子(电子、原子、分子等)运动规律的理论, 是深入探讨物质结构及其性能关系的理论基础。

结构化学讨论的对象是分子结构, 涉及电子、原子等微观粒子, 这些粒子的运动规律服从量子力学基本原理, 所以本章内容是学习结构化学必备的基础知识。

本章简单介绍量子力学诞生的实验基础, 引出微观粒子的能量量子化与波粒二象性两个最基本、最重要的概念。

以假设的形式介绍量子力学基本原理, 并应用讨论无限深势阱中的电子。

同时, 扼要地介绍了关于量子力学基本理论的争论。

第一节 量子力学实验基础与基本概念的引出人们把牛顿(Newton)力学、热力学、统计力学、麦克斯韦(Maxwell)电磁理论等称为经典物理学, 将量子力学以及在其基础上发展起来的量子场论称为量子理论。

<<结构化学>>

编辑推荐

《普通高等教育"十二五"规划教材:结构化学》可作为高等学校化学、应用化学等专业的本科生教材,也可供相关专业的教师和科研人员参考。

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>