

<<结构化学>>

图书基本信息

书名：<<结构化学>>

13位ISBN编号：9787303091904

10位ISBN编号：7303091904

出版时间：2008-6

出版时间：李奇、黄元河、陈光巨 北京师范大学出版社 (2008-06出版)

作者：李奇等著

页数：431

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;

## 前言

作为化学学科的一个重要分支，结构化学是化学类本科生各专业的核心课程之一。

结构化学是研究原子、分子和晶体的微观结构，以及原子和分子的运动规律，从而从原子、分子的尺度研究物质的结构及结构与物质的物理、化学性质的关系的一门基础学科。

为适应各种层次的需要，各类大专院校有众多的结构化学教材。

我欣喜地看到北京师范大学等7所高等师范院校共同编写的结构化学，作为国家级“十一五”规划教材即将出版了。

更可喜的是，编者中大部分都是我的学生。

他们将多年来在课堂教学中积累的教学经验编写成教材，并注重理论联系实际，拓展应用视野。

这本教材汇集了各校多位老师的教学经验，既保留了经典的结构化学内容，又注重吸收最新的科研成果。

教材突出了我校量子化学学科的优势，加强化学键理论部分的基础理论以及计算化学的实践与应用，例如量子化学在固体化学，生物大分子弱氢键等方面的应用；突出我校在“结构化学”课程体系方面改革的成果，突出晶体化学理论知识与材料科学的结合，例如分子间相互作用与氢键在超分子构建中的作用等。

这本全新的《结构化学》体现了结构化学方面的新成就和新进展，更加适应学科发展和教学改革的需要，更加适合普通综合性院校、地方院校、高等师范院校的使用。

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 内容概要

本教材全面介绍了结构化学基础知识，包括量子力学基本原理，量子化学方法处理原子结构、分子结构、配合物结构，以及晶体的点阵结构与x射线衍射，金属结构与性质，离子化合物的结构与性质等。

同时也介绍了结构化学理论及应用领域的最新进展，包括分子间相互作用与超分子化学，固体结构基础理论，计算化学原理与实验，新型材料的结构与性能等。

本教材注重介绍基本理论和方法，注重理论联系实际，拓展应用视野。

可以作为综合性大学和师范院校化学专业，以及应用化学、材料化学、生物化学、药物化学等相关专业的结构化学教材，也可以作为研究生和科技人员的学习参考书。

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 量子理论基础1.1 量子力学基础1.2 量子力学在简单体系中的应用1.3 量子力学若干基本概念习题第二章 原子的结构与性质2.1 单电子原子和离子2.2 量子数和波函数的物理意义2.3 多电子原子结构与原子轨道2.4 原子光谱习题第三章 双原子分子结构与分子光谱3.1 H<sub>2</sub>的结构和分子轨道理论3.2 H<sub>2</sub>分子的结构和价键理论3.3 双原子分子结构3.4 分子光谱与双原子分子结构测定习题第四章 分子对称性和群论4.1 对称性基本概念4.2 对称元素的组合与对称元素系4.3 对称操作的集合与分子点群4.4 分子对称性与分子性质习题第五章 多原子分子的结构和性质5.1 多原子分子结构的理论方法5.2 离域π键和共轭分子的结构5.3 前线轨道理论与轨道对称守恒原理习题第六章 配位化合物的结构和性质6.1 配位化合物的结构6.2 配位化合物的化学键理论6.3 簇合物的结构和性质6.4 物质的磁性和磁共振习题第七章 计算化学简介7.1 从头算 (ab initio) 方法7.2 半经验分子轨道法7.3 包含电子相关的分子轨道理论7.4 密度泛函理论 (DFT) 7.5 大型计算机程序的使用习题第八章 分子间作用力与超分子化学8.1 分子间相互作用8.2 氢键8.3 分子间弱相互作用8.4 超分子结构化学8.5 晶体工程习题第九章 晶体结构9.1 晶体的点阵结构9.2 晶体的对称性9.3 晶体的X射线衍射9.4 金属单质晶体结构9.5 合金结构9.6 离子晶体结构习题第十章 固体结构基础理论简介10.1 固体中的化学键10.2 能带理论10.3 晶体轨道法及应用简介第十一章 结构与材料主要参考文献

## &lt;&lt;结构化学&gt;&gt;

## 章节摘录

第一章 量子理论基础结构化学是在原子、分子的水平上深入到电子层次，研究物质的微观结构及其与宏观性能间关系的科学，所有这些微观粒子的运动都遵循量子力学规律。

量子理论的发展大致可分为两个阶段。

第一阶段是旧量子论（1900-1923）。

旧量子论是量子力学的前驱，它是在大量的事实与经典物理学理论产生了不可克服的矛盾的基础上提出来的。

第二阶段是量子力学理论（1924-）。

量子力学与相对论是20世纪物理学的两大支柱。

1927年德国物理学家W.H.Heitler和F.W.London运用量子力学理论成功地解释了氢分子的结构，标志着量子化学新学科的诞生，从此结构化学乃至整个化学学科有了可靠的理论基础。

本章主要介绍量子力学的产生过程以及量子力学的基本原理。

量子力学理论体系是以一些基本假设为基础的，这些基本假设如同几何学上的公理，从它们出发可以把量子力学定律逐个引申出来，这些假设的正确与否也可以从这些定律或所产生的结论被实验结果验证出来。

将量子力学的基本原理应用到简单模型体系讨论相关问题，为原子结构和分子结构的学习和讨论打下基础。

1.1 量子力学基础1900年以前，物理学的发展处于经典物理学阶段，它由I.Newton的经典力学、J.C.Maxwell的电磁波理论、L.Boltzmann统计物理学和J.W.Gibbs的热力学等组成。

这些理论构成了一个相当完善的体系，能很成功地解释常见的许多光、电、磁、热等现象，人们对复杂纷繁的物理现象本质的认识已经完成。



<<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>