

<<量子化学理论基础>>

图书基本信息

书名：<<量子化学理论基础>>

13位ISBN编号：9787560317021

10位ISBN编号：7560317022

出版时间：2002-3

出版时间：哈尔滨工业大学出版社

作者：陈念陔等

页数：315

字数：493000

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>

<<量子化学理论基础>>

内容概要

本书主要介绍量子化学的基本概念、原理以及对一些重要问题的处理，特别是分子轨道法的原理及应用。

全书共九章，第一章和第二章介绍量子力学的一些基本概念和简单体系薛定谔方程的解法；第三章介绍群论基础知识；第四章介绍休克尔分子轨道法的原理及应用；第五章、第六章和第七章介绍量子力学中的表象理论、电子自旋、角动量和微扰理论，为学习自洽场分子轨道理论提供必要的预备知识；第八章和第九章介绍自洽场分子轨道理论和在此基础上建立的从头计算及半经验计算方法。

除第九章外，每章均附有习题，并在附录 中有较详细的习题参考答案。

本书可作为高等学校有关专业高年级学生及研究生的“量子化学”教学参考用书，也可供教师和科研工作者参考。

<<量子化学理论基础>>

书籍目录

第一章 量子力学基础 1.1 量子理论基础——波粒二象性 1.2 状态与波函数 1.3 算符及其性质 1.4 力学量的算符表示和对易关系 1.5 厄米算符的本征函数的性质 1.6 态的叠加原理 1.7 力学量的平均值和方差平均值 1.8 不同力学量同时有确定值的条件 1.9 不确定原理 1.10 薛定谔 (Schrodinger) 方程 习题第二章 某些简单体系定态薛定谔方程的解 2.1 方盒中的粒子 2.2 勒让德函数和关联勒让德函数 2.3 粒子在中心力场中的运动 2.4 氢原子和类氢离子 2.5 线性谐振子 2.6 轨道角动量 习题第三章 群论基础 3.1 群的定义和基本概念 3.2 点群 3.3 群的表示 3.4 群论和量子化学 习题第四章 休克尔 (Hückel) 分子轨道理论 4.1 变分法 4.2 休克尔分子轨道法 4.3 对称性与群论的应用 4.4 分子轨道图形理论的应用 4.5 含杂原子或取代基的共轭分子 4.6 电子密度 4.7 键级 (或键序)、成键度和自由价 4.8 共轭分子的稳定性和反应活性 4.9 推广的HMO方法 (EHMO法) 习题第五章 表象理论 5.1 状态和力学量的表述方式 5.2 量子力学公式的矩阵表示 5.3 狄拉克 (Dirac) 符号 习题第六章 电子自旋和角动量 6.1 电子自旋 6.2 保里 (Pauli) 原理 6.3 斯雷特 (Slater) 行列式 6.4 角动量的一般讨论 6.5 角动量的相加 习题第七章 微扰理论 7.1 非简并态的微扰理论 7.2 简并态的微扰理论 7.3 微扰理论的应用 习题第八章 自洽场分子轨道理论 8.1 分子体系 8.2 单粒子模型 8.3 哈特里-福克 (Hartree-Fock) 方程 (H-F方程) 8.4 LCAO自洽场方法和罗汤方程 习题第九章 从头计算和半经验计算方法 9.1 理论基础 9.2 从头计算法的计算步骤 9.3 高斯 (Gauss) 函数 9.4 多中心积分的计算 9.5 半经验自洽场分子轨道法附录 矩阵代数附录 特征标表附录 习题参考答案

<<量子化学理论基础>>

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>