

量子化学基础



[量子化学基础_下载链接1](#)

著者:刘若庄

出版者:科学出版社

出版时间:1983-9

装帧:平装

isbn:

本书是量子化学原理、方法及应用的初步介绍。全书共八章。内容包括量子力学基础知识，原子结构的量子理论，分子轨道理论及其应用，配位场理论，以及价键理论的简介

。内容由浅入深，着重阐明物理观念，使初学者易于掌握，并通过典型实例说明理论的应用。

本书可作为高等院校化学系高年级学生的参考书、本科选修量子化学的教科书、无机和有机化学专业的教师和科研人员的入门读物。

作者介绍:

刘若庄，量子化学家。1925年5月25日生。北京市人。1947年毕业于北京辅仁大学化学系，同年考取北京大学物理化学专业研究生，1950年毕业。是1963年9月至1965年7月教育部委托吉林大学举办的物质结构学术讨论班成员。历任辅仁大学、北京大学、北京师范大学化学系助教、讲师和副教授，1959年任北京师范大学化学系物理化学教研室主任，1979年任北京师范大学化学系教授、校学位委员会副主任。1978年任国家科委化学学科组成员。1981年国务院批准为第一届博士研究生导师。1985年任墨西哥国立大学Moshinsky讲座客座教授。

目录: 第一章 量子力学基础知识

§ 1.1 Schrödinger方程及其来源

§ 1.2 Schrödinger方程的算符形式

§ 1.3 算符和物理量

§ 1.4 一维势箱中的粒子

§ 1.5 在半径为 r 的圆环上运动的粒子

参考文献

第二章 原子结构

§ 2.1 角动量

§ 2.2 类氢原子体系

§ 2.3 多电子原子

§ 2.4 量子力学的两种近似方法——变分法和微扰法

§ 2.5 原子轨道的自洽场方法简介

参考文献

第三章 简单分子轨道理论（电子独立运动模型）

§ 3.1 简单分子轨道

§ 3.2 氢分子

§ 3.3 分子轨道法成键三原则

§ 3.4 N_2 分子的结构

§ 3.5 异核双原子分子

§ 3.6 乙烯和乙炔中 π 键强度的差异

§ 3.7 三中心键

§ 3.8 定域分子轨道和离域分子轨道

§ 3.9 分子轨道理论的图示方法——生成轨道（GO）法

参考文献

第四章 共轭分子的结构与性能

§ 4.1 Hückel分子轨道法（HMO法）

§ 4.2 分子的对称性和群论的应用

§ 4.3 化学平衡和分子的反应性能

§ 4.4 微扰分子轨道理论

§ 4.5 分子轨道的图形理论

参考文献

第五章 分子轨道对称守恒原理

§ 5.1 周环反应

§ 5.2 分子轨道对称守恒原理

§ 5.3 分子轨道对称守恒原理的新发现

§ 5.4 键对称规律及其应用

参考文献

第六章 自洽场分子轨道法简介

§ 6.1 多电子体系（分子）的近似波函数——“轨道近似”

§ 6.2 多电子体系（分子）的能量表达式

§ 6.3 Hartree-Fock自洽场方程

§ 6.4 LCAO-MO自洽场方程——Roothaan方程

§ 6.5 单组态（单行列式波函数）自洽场方法的局限性——相关能

§ 6.6 自洽场分子轨道理论的从头算法与半经验法间的关系

参考文献

第七章 价键法简介及其与分子轨道法对比

§ 7.1 氢分子（价键法）

§ 7.2 氢分子（LCAO-MO法）

§ 7.3 价键法与分子轨道法的初步对比

§ 7.4 多原子分子——VB法与MO法对比

参考文献

第八章 配位场理论

§ 8.1 自由原子的结构

§ 8.2 有关群论和量子力学的补充知识

§ 8.3 谱项能量的计算

§ 8.4 晶体场理论

§ 8.5 配位场理论

参考文献

附录 I Laplace算符的变换

附录 II 几种点群的特征标表

• • • • • ([收起](#))

[量子化学基础_下载链接1](#)

标签

量子化学

化学

量子

物理化学

物化

评论

哈哈哈，这本书的条目是我创建的！目录已经加上了！！！！弄完了！

难得好书！三十多年过去了仍然有很高的价值，推荐给所有大二的同学参考。学有余力的高中同学也可以阅读。添加了封面。

[量子化学基础_下载链接1](#)

书评

[量子化学基础_下载链接1](#)