

<<结构化学>>

图书基本信息

书名：<<结构化学>>

13位ISBN编号：9787030216748

10位ISBN编号：7030216741

出版时间：2008-5

出版时间：科学

作者：王军

页数：249

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

本书在保留经典结构化学内容的基础上，减少了部分繁琐的数学运算过程，增加了对基本概念、基本原理的解释及阐述。

全书共七章，主要包括：量子力学基础，原子的结构和性质，原子光谱，双原子分子的结构和性质，分子的对称性，分子点群，多原子分子的结构和性质，晶体的点阵结构和性质，晶体的x射线衍射分析，分子光谱等内容。

为方便读者自学，每章后均编排了习题，书后附有部分习题参考答案。

本书可作为高等理工和师范院校化学、应用化学、化学工程与工艺、材料化学、冶金化学、环境化学、生物化学、药物化学等专业本科生的教学用书。

书籍目录

前言第1章 量子力学基础1.1 量子论的产生及微观物理现象的特征1.1.1 量子论的产生1.1.2 旧量子论的局限1.1.3 微观物理现象的特征1.2 物质的波动性和粒子性1.2.1 光的微粒说和波动说1.2.2 实物粒子的波粒二象性1.3 量子力学基本假设之一——波函数1.3.1 电子衍射实验的再认识1.3.2 波函数的物理意义1.3.3 归一化波函数1.4 量子力学基本假设之二——力学量算符1.4.1 算符1.4.2 算符的运算法则1.4.3 线性算符1.4.4 算符的本征函数和本征方程1.4.5 自轭算符1.4.6 线性自轭算符1.5 量子力学基本假设之三——薛定谔方程1.5.1 薛定谔方程1.5.2 波函数的标准化条件1.6 量子力学基本假设之四——态的叠加1.6.1 力学量具有确定值的条件1.6.2 不同力学量同时具有确定值的条件1.6.3 力学量的平均值1.7 量子力学基本假设之五——泡利不相容原理1.7.1 泡利不相容原理的量子力学表达1.7.2 费米子和玻色子1.8 一维箱中粒子的薛定谔方程1.8.1 一维箱中的粒子1.8.2 一维箱中粒子的薛定谔方程及其解1.8.3 薛定谔方程解的讨论1.9 三维箱中粒子的薛定谔方程1.9.1 三维箱中的粒子1.9.2 三维箱中粒子的薛定谔方程及其解习题第2章 原子的结构、性质和原子光谱2.1 单电子原子的薛定谔方程2.2 单电子原子薛定谔方程的一般解2.2.1 薛定谔方程的变量分离2.2.2 () 方程的解2.2.3 () 方程的解2.2.4 $R(r)$ 方程的解2.2.5 单电子原子薛定谔方程的一般解2.3 单电子原子运动状态的描述2.3.1 主量子数 n 2.3.2 角量子数 l 2.3.3 磁量子数 m 2.3.4 自旋量子数 s 2.3.5 自旋磁量子数 m_s 2.3.6 总量子数 j 2.3.7 总磁量子数 m_j 2.4 原子轨道的图形表示2.4.1 波函数的节面数2.4.2 径向分布图2.4.3 角度分布图2.4.4 原子轨道轮廓图2.4.5 空间分布2.4.6 氢原子的 s 态2.5 多电子原子结构2.5.1 变分法原理2.5.2 单电子近似和中心力场近似2.5.3 原子核外电子的排布2.6 原子光谱2.6.1 原子光谱的概念2.6.2 氢原子光谱2.6.3 碱金属的原子光谱2.6.4 多电子原子的状态和光谱项符号2.6.5 由电子组态确定光谱项2.6.6 原子能级图2.6.7 原子的光谱项习题第3章 双原子分子的结构和性质3.1 氢分子离子的结构和共价键的本质3.1.1 氢分子离子的薛定谔方程3.1.2 线性变分法3.1.3 变分法解氢分子离子的薛定谔方程3.1.4 三个积分 H_{aa} , H_{ab} 和 S_{ab} 的性质3.1.5 氢分子离子的结构3.1.6 共价键的本质3.2 分子轨道理论3.2.1 单电子波函数近似3.2.2 分子轨道是原子轨道的线性组合3.2.3 分子轨道的成键三原则3.3 双原子分子的结构3.3.1 同核双原子分子3.3.2 异核双原子分子习题第4章 分子的对称性4.1 对称操作和对称元素4.1.1 旋转和旋转轴4.1.2 反演和对称中心4.1.3 反映和对称面4.1.4 旋转反演和反轴4.1.5 旋转反映和映轴4.2 对称元素的组合和群的乘法表4.2.1 对称元素的组合定理4.2.2 群的定义4.2.3 群的乘法表4.3 分子点群4.3.1 C_2 群4.3.2 C_{nh} 群4.3.3 G_{nv} 群4.3.4 S_n 群和 C_n 群4.3.5 D_n 群4.3.6 D_{nh} 群4.3.7 D_{nd} 群4.3.8 T 群, Th 群和 T_d 群4.3.9 O 群和 O_h 群4.3.10 I 群和 I_h 群4.4 分子的偶极矩和极化率4.4.1 分子的偶极矩4.4.2 分子偶极矩与对称性的关系4.4.3 分子的诱导偶极矩和极化率4.4.4 分子的摩尔折射度4.5 分子的对称性与旋光性习题第5章 多原子分子的结构和性质5.1 简单分子轨道理论5.1.1 简单分子轨道理论的基本内容5.1.2 用分子轨道理论处理丁二烯5.1.3 电荷密度, 键序, 自由价和分子图5.1.4 用简单分子轨道理论处理环状共轭体系5.1.5 分子图的应用5.2 价键理论简介5.2.1 价键理论要点5.2.2 实例5.3 杂化轨道理论5.3.1 等性杂化轨道理论5.3.2 sp 等性杂化轨道5.3.3 sp^d 杂化简介5.3.4 不等性杂化轨道—— H_2O 和 NH_3 的结构分析5.4 离域分子轨道理论5.4.1 定域分子轨道5.4.2 离域分子轨道理论5.5 配位场理论5.5.1 配合物的一般介绍5.5.2 配合物的价键理论5.5.3 配位场理论5.5.4 分子轨道理论的解释5.5 分子轨道的对称性及反应机理5.5.1 前线轨道理论5.5.2 分子轨道的对称守恒原理习题第6章 晶体结构6.1 晶体结构的周期性6.1.1 晶体的性质6.1.2 等同点6.1.3 点阵6.1.4 晶格和晶格常数6.1.5 14种布拉维晶格6.2 晶体的宏观对称性6.2.1 晶胞和晶胞参数6.2.2 宏观对称性6.2.3 七个晶系6.2.4 32个宏观对称类型6.3 晶体的定向和晶面符号6.4 晶体的微观对称性6.4.1 平移和平移轴6.4.2 螺旋旋转与螺旋轴6.4.3 滑移反映和滑移面6.5 晶体的230个空间群6.6 圆球的堆积方式及金属晶体6.6.1 等径球的密堆积6.6.2 不等径圆球的堆积6.6.3 金属晶体6.7 离子晶体6.7.1 正、负离子间的相互作用势能6.7.2 晶格能6.7.3 离子晶体6.8 共价晶体、分子晶体和混合键型晶体6.8.1 共价晶体6.8.2 分子晶体6.8.3 混合键型晶体6.9 共价半径、原子半径和离子半径6.9.1 共价半径6.9.2 原子半径6.9.3 离子半径习题第7章 物质结构分析方法简介7.1 X射线衍射分析7.1.1 x射线的产生及性质7.1.2 衍射的方向7.1.3 衍射的强度7.1.4 X射线衍射分析方法7.1.5 应用7.2 分子光谱7.2.1 分子光谱简介7.2.2 双原子分子的转动光谱7.2.3 双原子分子的振动光谱7.2.4 双原子分子的振动—转动光谱7.2.5 红外光谱习题部分习题参考答案参考文献附录

章节摘录

第1章 量子力学基础 1.1 量子论的产生及微观物理现象的特征 1.1.1 量子论的产生 19世纪末期, 经典物理学的发展已经相当完善。

在力学方面有牛顿 (Newton) 的力学体系; 在电、磁、光学方面有麦克斯韦 (Maxwell) 方程组; 在热现象方面有热力学及玻耳兹曼 (Boltzmann) 和吉布斯 (Gibbs) 等人建立的统计物理学。

这些理论构成了一个完整的经典物理学体系, 可以解释各种常见的物理现象。

但随着科学的发展, 又发现了一些新的用上述经典物理学理论无法解释的实验现象, 其中最著名的三个现象是黑体辐射、光电效应和原子光谱。

1. 黑体辐射 所谓黑体就是指能吸收全部外来电磁波的物体, 一般的黑色物体近似于黑体。加热黑体时它又能发射出各种波长的电磁波, 称为黑体辐射。

经典电磁理论假定黑体辐射是由黑体中带电粒子振动发出的, 但通过经典热力学和统计力学理论计算得到的黑体辐射能量随波长的变化规律同实验得到的曲线相矛盾, 见图1—1。

1900年, 普朗克 (Planck) 提出了能量量子化的概念, 假设黑体中的带电粒子以频率 ν 做简谐振动, 能量 E 只能取一个最小能量 $h\nu$ 的整数倍, 即 $E = nh\nu$, $n=0, 1, 2, \dots$ 。

其中, $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$, 称为普朗克常量。

用这一观点可以很好的解释黑体辐射现象, 这个假设称为能量量子化假设。

2. 光电效应 一定条件下, 光照射到金属表面时, 金属中的电子会吸收光子的能量并有可能克服金属晶格的束缚而逸出金属表面成为光电子, 光电子在电场作用下从阴极飞向阳极产生光电流, 检流计显示有电流通过, 这种现象称为光电效应, 见图1—2。

<<结构化学>>

编辑推荐

保留了经典结构化学的主要内容，减少了部分繁琐的数学运算过程，增加了对基本概念，基本原理的解释及阐述。

可使学生深刻理解结构化学的基本知识，掌握结构化学研究问题的方式和方法，提高灵活运用结构化学知识能力，培养从事化学科学研究的素质。

可作为高等理工和师范院校化学、应用化学、化学工程与工艺、材料化学、冶金化学、环境化学、生物化学、药物化学等专业本科生的教材。

结构化学是一门比较抽象的科学，包含许多重要的概念、原理和规律。

通过对这些知识的学习和理解，我们能够将物质结构和性能联系起来并指导化学实践。

本书保留了经典结构化学的主要内容，包括量子力学基础、原子的结构和性质、原子光谱、双原子分子的结构和性质、分子光谱、分子的对称性、晶体的结构和性质、晶体的X射线衍射分析等，减少了部分繁琐的数学运算过程，增加了对基本概念、基本原理的解释及阐述，目的在于使学生深刻理解结构化学的基本知识，掌握结构化学研究问题的方式和方法，提高灵活运用结构化学知识的能力，培养从事化学科学研究的素质。

<<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>