

《量子化学》 教学大纲

安徽师范大学 化学与材料科学学院

物理化学教研室

2005.8

《量子化学》教学大纲

学时：34 学时

学分：2 学分

适用专业：化学教育、应用化学、材料化学

大纲执笔人：董吉溪

大纲审定人：叶世勇

一、本课程的内容和目的

《量子化学》选修课是一门应用量子力学基本原理及方法去研究和解决化学问题的理论课。学习本课程的目的是掌握和应用现代化学的理论，去分析化学中的原子结构和分子结构。本课程主要内容有：量子力学基础、原子结构、简单分子轨道理论、共轨分子的结构与性能、分子轨道对称守恒原理、自洽场分子轨道法等。

二、教材与参考书目

教材：《量子化学基础》刘若庄等编 科学出版社

参考书目：

- 1、《基础量子化学原理》吉林大学 封继康编 高等教育出版社
- 2、《量子化学引论》曹阳编 人民教育出版社

各章节基本要求和基本内容

第一章 量子力学基础

要求：掌握量子力学的基本原理及一些重要概念和方程。

内容：薛定谔方程及其来源，薛定谔方程算符形式，算符和物理量，一维势箱中的粒子。

第二章 原子结构

要求：应用量子力学原理处理类氢原子和多电子原子体系，了解量子力学两种近似方法（变分法和微扰法）

内容：角动量、类氢原子体系、多电子原子、变分法和微扰法，自洽场方法简介。

第三章 分子轨道理论

要求：应用分子轨道理论处理氢分子、氮分子、异核双原子分子。

内容：分子轨道法、氢分子、氮分子、三中心键、定域分子轨道和离域分子轨道、生成轨道（GO）法。

第四章 共轭分子的结构与性能

要求：了解 HMO 法，对称性和群论及微扰分子轨道理论。

内容：HMO 法、分子的对称性和群论应用，化学平衡和分子的反应性能，微扰分子轨道理论。

第五章 分子轨道对称守恒原理

要求：掌握分子轨道对称守恒原理，并会应用。

内容：周环反应，分子轨道对称守恒原理，分子轨道对称守恒原理的新发展。

第六章 自洽场分子轨道法简介

要求：掌握自洽场分子轨道法的基本原理，了解哈特里——福特自洽场方程

内容：轨道近似，多电子体系的能量表达式。哈特里——福克自洽场方程。LCAO——MO 的自洽场方程。从头计算法与半

经验法间关系。

考试方式及方法：举行一次期末闭卷考，时间 2 小时，教考分离。

题目类型有：填空、单项选择、简答及计算题。