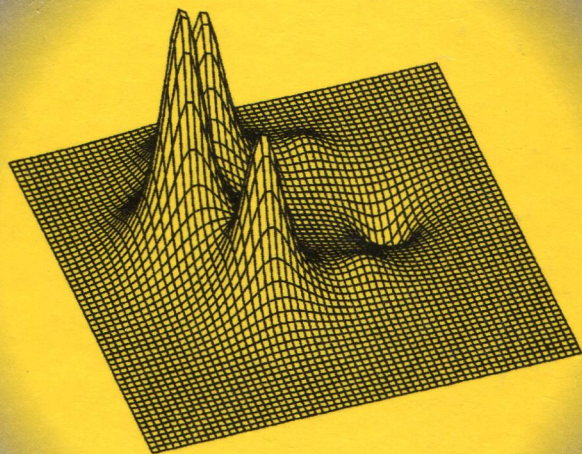


ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИИ ●

Н.Ф. Степанов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



Издательство «МИР»
Издательство Московского университета

УДК 530.145 + 541.1
ББК 17.8
С79

Степанов Н. Ф.

С79 Квантовая механика и квантовая химия. — М.: Мир, 2012. — 519 с., ил. (Теоретические основы химии).

ISBN 978-5-03-003414-0

Учебное издание соответствует программе учебных курсов университетов. Подробно излагаются основные положения квантовой теории и ее химические приложения. Каждая глава снабжена набором вопросов и задач для самостоятельной работы.

Для студентов университетов и технических вузов.

УДК 530.145 + 541.1
ББК 17.8

Издание осуществлено совместно с Издательством Московского университета

Редакция литературы по химии

Учебное издание

Николай Федорович Степанов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Зав. редакцией канд. хим. наук Т. И. Почкаева. Ведущий редактор Р. Г. Есакова.
Художник Э. А. Смирнов. Художественный редактор Н. В. Зотова.
Технический редактор Е. В. Денюкова. Корректор Н. Ф. Мазотова

Подписано в печать 22.08.12. Формат 60×90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Гарнитура NewtonС. Объем 16,25 бум. л. Усл. печ. л. 32,50. Уч.-изд. л. 31,23.
Изд. № 3/9781.

Издательство «Мир»

Министерства РФ по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.
107996, ГСП-6, Москва, 1-й Рижский пер., 2

ISBN 978-5-03-003414-0

Оглавление

Предисловие.....	3
Краткая вспомогательная сводка определений и соотношений из линейной алгебры и функционального анализа.....	8
Глава I. ИСХОДНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.....	17
§ 1. Основные понятия и постулаты квантовой механики.....	17
§ 2. Простейшие одномерные задачи.....	27
§ 3. Математический аппарат квантовой механики.....	42
§ 4. Матричное представление операторов.....	53
§ 5. Одномерное движение. Задача о гармоническом осцилляторе.....	69
Глава II. ЦЕНТРАЛЬНОЕ ПОЛЕ И МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ.....	82
§ 1. Движение частицы в центральном поле.....	82
§ 2. Теория момента количества движения.....	92
§ 3. Атом водорода.....	108
§ 4. Внешнее электромагнитное поле.....	120
§ 5. Спин.....	132
Глава III. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.....	140
§ 1. Вариационный метод.....	140
§ 2. Стационарная теория возмущений.....	155
§ 3. Временная теория возмущений.....	162
§ 4. Нестационарные задачи квантовой механики.....	174
Глава IV. ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ.....	190
§ 1. Законы сохранения.....	190
§ 2. Группы симметрии.....	197

§ 3. Системы тождественных частиц. Группы перестановок и точечные группы симметрии.....	213
§ 4. Теорема Вигнера-Экарта и правила отбора.....	222
Глава V. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ РЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЗАДАЧ.....	231
§ 1. Молекулярное уравнение Шредингера	231
§ 2. Адиабатическое приближение.....	243
§ 3. Электронное волновое уравнение.....	254
§ 4. Метод валентных схем.....	269
Глава VI. ОДНОЭЛЕКТРОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.....	276
§ 1. Метод самосогласованного поля.....	276
§ 2. Метод самосогласованного поля. Прикладные проблемы.....	288
§ 3. Молекула H_2	299
§ 4. Симметрия волновых функций и орбиталей.....	308
§ 5. Методы функционала плотности	319
Глава VII. ДАЛЬНЕЙШИЕ УПРОЩЕНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ	
ЭЛЕКТРОННОЙ ЗАДАЧИ.....	326
§ 1. Полуэмпирические методы квантовой химии в приближении нулевого дифференциального перекрывания.....	326
§ 2. Расширенный метод Хюккеля.....	340
§ 3. Различные типы молекулярных орбиталей	350
§ 4. Простой метод Хюккеля	365
§ 5. Метод Хюккеля: теория возмущений.....	381
Глава VIII. ТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ	
ПОЛЕ.....	391
§ 1. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействие.....	391
§ 2. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.....	402
Глава IX. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ДИАГРАММЫ И УЧЕТ	
СИММЕТРИИ.....	416
§ 1. Корреляционные диаграммы.....	416
§ 2. Сохранение орбитальной симметрии.....	427

Глава X. ДВИЖЕНИЕ ЯДЕР.....	443
§ 1. Потенциальные поверхности и симметрия.....	443
§ 2. Электронно-колебательное взаимодействие.....	450
Глава XI. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ	459
§ 1. О природе химической связи.....	459
§ 2. Межмолекулярные взаимодействия и химическая связь в конденсиро- ванных системах.....	475
§ 3. Атомы в молекулах	484
Послесловие.....	495
Приложение 1. Соотношение атомных и ряда других единиц.....	498
Приложение 2. Свойства δ -функции.....	499
Приложение 3. Таблицы характеров некоторых точечных групп.....	500
Литература.....	506
Предметный указатель.....	509