

《结构化学》考试大纲

考试科目：结构化学

科目代码：867

适用专业：化学

参考书目：周公度和段连运 编著，《结构化学基础》（第三版），北京大学出版社（2002）。

主要参考书：

- 1 周公度和段连运 编著，结构化学基础（第二版），北京大学出版社（1998）。
- 2 徐光宪和王祥云，物质结构（第二版）高等教育出版社（1987）。
- 3 潘道皑，赵成大和郑载兴，物质结构（第二版），高等教育出版社（1989）。
- 4 钱逸泰 编著，结晶化学导论（第二版）中国科技大学出版社（1999）。

第一章 量子力学基础知识

1.1 微观粒子的运动特征：黑体辐射和能量量子化；光电效应和光子；实物微粒的波粒二象性；测不准原理。

1.2 量子力学基本假设：波函数和 微观粒子的状态；力学量和算符；本征态、本征值和 Schrödinger 方程；态叠加原理和 Pauli 原理。

1.3 应用一箱中粒子的 Schrödinger 方程。

第二章 原子的结构和性质

2.1 单电子原子的 Schrodinger 方程及其解。

2.2 量子数的物理意义。

2.3 波函数和电子云的图形。

2.4 多电子原子的结构。

2.5 元素周期表与元素周期性质。

2.6 原子光谱。

第三章 共价键和双原子分子的结构和性质

3.1 H_2^+ 的结构和共价键的本质。

3.2 分子轨道理论和双原子分子的结构。

3.3 H_2 分子的结构和价键理论。

3.4 分子光谱。

3.5 光电子能谱。

第四章 分子对称性

4.1 对称操作和对称元素。

4.2 对称操作群与对称元素的组合。

4.3 分子的点群。

4.4 分子的偶极矩和极化率。

4.5 分子的手性和旋光性。

4.6 群的表示。

第五章 多原子分子中的化学键

5.1 价电子对互斥理论（VSEPR）。

5.2 杂化轨道理论。

5.3 离域分子轨道理论。

5.4 休克尔分子轨道法。

- 5.5 离域 π 键和共轭效应。
- 5.6 分子轨道的对称性和反应机理。
- 5.7 缺电子多中心键和硼烷的结构。
- 5.8 非金属元素的结构特征。
- 5.9 共价键的键长和键。

第六章 配位化合物的结构和性质

- 6.1 配位场理论。
- 6.2 σ - π 配键与有关配位化合物结构和性质。
- 6.3 金属-金属四重键。
- 6.4 过渡金属簇化合物的结构。
- 6.5 物质的磁性和磁共振。

第七章 晶体结构

- 7.1 晶体的点阵理论。
- 7.2 晶体结构的对称性。
- 7.3 金属晶体和晶体结构的能带理论。
- 7.4 离子晶体和离子键。
- 7.5 共价键型晶体和混合型晶体。
- 7.6 分子型晶体和分子间作用力。