

# 《量子化学》教学大纲

课程代码: NANA3011  
课程名称: 量子化学  
英文名称: Quantum Chemistry  
课程性质: 专业必修课程  
学分/学时: 3 学分/54 学时  
考核方式: 闭卷笔试  
开课学期: 第 5 学期  
适用专业: 纳米材料科学与工程、纳米医学、纳米器件技术  
先修课程: 物理化学  
后续课程: 量子力学  
开课单位: 纳米科学技术学院  
课程负责人: 程涛  
大纲执笔人: 程涛  
大纲审核人: 邵名望, 李青  
选用教材: 《量子化学教程》(编著: 黄明宝, 科学出版社, 2015 年)  
《结构化学基础(第五版)》(作者: 周公度、段连运, 北京大学出版社, 2017 年)

## 一、课程目标

通过本课程的理论教学, 使学生具备下列能力:

1. 掌握原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 了解结构化学与量子化学在相关学科中的应用。能够针对目标纳米材料或纳米器件, 选用合理的量子化学的研究方法, 实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。(支撑毕业要求指标点 1-1)
2. 培养学生从物质结构与物质性能关系的基本规律出发, 分析化学问题、解释化学现象的能力。能根据特定的研究对象, 在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出合理优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析。(支撑毕业要求指标点 1-2)
3. 能正确运用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质, 能使用专业制图软件 and 数据处理软件, 对量子化学结果进行数学处理和科学整理, 并与预期结果或实验结果进行比较和分析, 进而对优化实验条件和方案进行理论指导, 对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟。(支撑毕业要求指标点 2-1)

## 二、教学内容

### 第一章 量子力学基础 (支撑课程目标 1、2)

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 (支撑课程目标 1、2)

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 (支撑课程目标 1、2、3)

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 (支撑课程目标 2、3)

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 (支撑课程目标 2、3)

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 (支撑课程目标 2、3)

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。

### 三、考核方式

闭卷笔试+课程报告

#### 成绩评定方法:

笔试成绩 60%, 课程报告 20%, 平时成绩 20% (含作业、期中考试)

	笔试相关试题占分比例%	课程报告占分比例%	平时作业相关内容占分比例	课程分目标达成度评价方法
课程目标 1	30%	20%	40%	分目标达成度={0.6 × (分目标试题平均/分目标试题总分) + 0.2 × (课程报告分目标平均成绩/分目标总分) + 0.2 × (分目标平时成绩) / 分目标总分}
课程目标 2	30%	40%	30%	
课程目标 3	40%	40%	30%	

#### 评分标准:

课程目标	90-100 (优秀)	75-89 (良好)	60-74 (及格)	0-59 (不及格)
1. 掌握原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 了解结构化学与量子化学与在	能够准确掌握原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 了解结构化学与量子化学	合理掌握了原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 了解结构化学与量子化学与	基本掌握了原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 了解结构化学与量子化学与	并不能掌握基本掌握了原子、分子的基本概念, 微观结构和微观粒子运动规律; 并不了解研究分子和晶体结构的基本原理以及近代测试方法和理论计算方法; 并不了解结构化学与量子化学的发展史、现状和趋势; 并不了

<p>相关学科中的应用。能够针对目标纳米材料或纳米器件,选用合理的量子化学的研究方法,实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。 <b>(支撑毕业要求指标点 1-1)</b></p>	<p>与在相关学科中的应用。能够正确地针对目标纳米材料或纳米器件,选用合理的量子化学的研究方法,实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。</p>	<p>在相关学科中的应用。能够合理地针对目标纳米材料或纳米器件,选用合理的量子化学的研究方法,实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。</p>	<p>在相关学科中的应用。基本能够针对目标纳米材料或纳米器件,选用合理的量子化学的研究方法,实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。</p>	<p>解结构化学与量子化学与在相关学科中的应用。不能够针对目标纳米材料或纳米器件,选用合理的量子化学的研究方法,实现功能纳米材料的可控制备或纳米器件的有效电子结构性质分析。</p>
<p>2. 培养学生从物质结构与物质性能关系的基本规律出发,分析化学问题、解释化学现象的能力。能根据特定的研究对象,在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出合理优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析。 <b>(支撑毕业要求指标点 1-2)</b></p>	<p>能灵活运用物质结构与物质性能关系的基本规律,分析化学问题、解释化学现象的能力。能准确无误地根据特定的研究对象,在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出合理优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析。</p>	<p>能运用物质结构与物质性能关系的基本规律,分析化学问题、解释化学现象的能力。能根据特定的研究对象,在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出合理优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析。</p>	<p>具有运用物质结构与物质性能关系的基本规律,分析化学问题、解释化学现象的能力。能根据特定的研究对象,在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析,但存在缺陷。</p>	<p>不具有运用物质结构与物质性能关系的基本规律,分析化学问题、解释化学现象的能力。能根据特定的研究对象,在纳米材料或纳米器件设计方案合理优化的过程中基于量子化学的理论基础上提出优化方向并对研究对象进行全面的电子结构和化学性质分析</p>
<p>3. 能正确运用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质,能使用专业制图软件和数据</p>	<p>能独立正确地用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质,能使用专业制图软件和数据</p>	<p>能合理地用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质,能使用专业制图软件和数据</p>	<p>能用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质,能使用专业制图软件和数据</p>	<p>不能用量子理论的方法从构成体系的基本粒子的微观运动状态出发求算纳米体系的宏观性质,能使用专业制图软件和数据</p>

<p>数据处理软件，对量子化学结果进行数学处理和科学整理，并与预期结果或实验结果进行比较和分析，进而对优化实验条件和方案进行理论指导，对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟。<b>(支撑毕业要求指标点 2-1)</b></p>	<p>数据处理软件，对量子化学结果进行数学处理和科学整理，并与预期结果或实验结果进行比较和分析，进而对优化实验条件和方案进行理论指导，对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟。</p>	<p>处理软件，对量子化学结果进行数学处理和科学整理，并与预期结果或实验结果进行比较和分析，进而对优化实验条件和方案进行理论指导，对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟。</p>	<p>件，对量子化学结果进行数学处理和科学整理，并与预期结果或实验结果进行比较和分析，进而对优化实验条件和方案进行理论指导，能对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟，但存在缺陷与不足。</p>	<p>软件，对量子化学结果进行数学处理和科学整理，并与预期结果或实验结果进行比较和分析，进而对优化实验条件和方案进行理论指导，能对纳米科技领域的复杂问题进行预测与模拟</p>
---	---	---	--	---