**华北电力大学2023年博士生入学考试初试科目考试大纲**

科目名称：量子化学

**一、 考试总体要求**

要求考生全面地掌握量子化学的基本概念及基本原理，具备使用量子化学方法研究材料微观结构和性能关系的能力。

**二、 考试内容**

1. 量子力学基础：波函数基本概念；算符；原子单位。
2. 原子结构和多原子分子结构：氢原子以及类氢离子；Slater行列式；Born-Oppenheimer近似；LCAO-MO近似；分子轨道理论以及杂化轨道。
3. 群论基础和应用：熟练掌握判断点群的方法；了解前线轨道理论。
4. 量子化学从头算方法：基组；赝势基组（有效核心势方法）的优点和合理性；能量梯度；平衡几何构型优化等基本概念。
5. Hartree-Fork方法：开窍层和闭壳层自洽场方法；Koopmans定理；电荷集居分析。
6. 密度泛函理论：密度泛函理论的基本原理（Hohenberg-Kohn定理等）；电子密度函数；LDA，GGA和杂化泛函的基本概念。
7. 分子光谱：基本原理；原子光谱；分子的转动光谱、振动光谱和电子光谱。
8. 基础固体量子理论：倒格子空间；布里渊区；态密度；能带；费米能级；晶体轨道法处理方法。

**三、 考试题型**

名词解释、简答题、作图题、计算题。

**四、 参考书目**

1.《量子化学简明教程》，林梦海编著，化学工业出版社。

2.《量子化学》，陈光巨、黄元河主编，华东理工大学出版社。