

## <<势能面与分子碰撞理论>>

### 图书基本信息

书名：<<势能面与分子碰撞理论>>

13位ISBN编号：9787560140803

10位ISBN编号：7560140807

出版时间：2009-1

出版时间：吉林大学出版社

作者：韩克利,孙本繁

页数：267

字数：269000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## &lt;&lt;势能面与分子碰撞理论&gt;&gt;

## 内容概要

分子碰撞理论的研究，已经有七十多年的历史。

这门学科的创建者是Gyng H和Polanyi M。

1964年，Pimentel G根据Polanyi J C红外化学发光反应碰撞的研究结果，发明了HCl化学激光器，使这门学科的研究更加深入和理论化。

一个宏观反应往往包含许多同时存在的分子碰撞的微观过程，宏观现象是微观现象统计综合结果。微观过程能提供基元过程的动力学信息——激发态粒子的形成过程，传能过程，粒子数在能级布居反转的程度——从而寻找新的化学激光新体系。

分子碰撞理论是许多新兴学科建立与发展的理论基础。

如激光化学、大气化学、燃烧化学、等离子体化学、表面催化学等。

近些年来，生命科学(有机大分子)也开始应用分子碰撞理论。

两个分子的碰撞即意味着它们在相互接近过程中发生了相互作用，动量传递、能量传递，甚至改变分子的结构，由反应物变成产物，如 $A+Bc \rightarrow AB+C$ 或 $AC+B$ ， $A+BC$ ， $A+B+C$ 四种结果。

本学科的理论基础涉及量子力学、经典力学、统计力学、光谱学、固体物理、物理化学、量子化学。

分子碰撞体系的理论可以分成两个方面的问题，一个是分子体系的结构计算，一个是动力学理论计算问题，所以本书标题专门突出势能面这一名词。

实际我们所面临的体系是一个由  $n$  个核和  $N$  个电子所组成的相互作用体系，利用B-0近似并考虑电子运动比核运动快得多，可以把核与电子运动分离。

被定住的核的Hamiltonian算符，可以用来建立量子化学计算分子结构。

有了势能面，利用量子或经典碰撞散射理论就可以得到微分散射截面，然后利用宏观统计力学就可以获得宏观反应速率常数。

## &lt;&lt;势能面与分子碰撞理论&gt;&gt;

## 书籍目录

导论第一章 势能面 § 1.1 Born-Oppenheimer定理 (或近似) ——引出势能面概念 § 1.2 势能面的从头  
计算法 § 1.3 势能面计算的半理论方法 § 1.4 半经验方法——DIM方法 § 1.5 经验方法及PES的拟合形  
式——为了散射动力学计算 § 1.6 势能面的图解形式 § 1.7 从头算与半经验方法势能面主要特征的比  
较 (共线H3体系) § 1.8 反应途径解析 § 1.9 应用突变理论研究势能剖面曲线的拓扑性质第二章 双体  
弹性碰撞的量子理论第三章 非弹性散射 (激散发射) 第四章 量子反应动力学 § 4.1 n个粒子的几率流  
密度 § 4.2 单粒子被一个一维势阱或势垒的散射 § 4.3 单粒子被一个一维势阱或势垒的散射——共振  
和隧道效应 § 4.4 三原子体系共线反应散射——形式与数值方法 § 4.5 三原子三维反应散射 § 4.6 平面  
三原子体系量子力学反应散射理论 § 4.7 超柱坐标下的双原子、双原子反应散射理论第五章 处理弹性碰  
撞的经典理论第六章 准经典碰撞理论 § 6.1 理论方法——以三原子体系为例 § 6.2 计算方法 § 6.3  
F+H<sub>2</sub>反应散射内态角分布Monte Carlo计算结果 § 6.4 Ba + 正溴代烷烃反应动力学准经典轨线研究第七  
章 四中心碰撞的准经典轨迹研究第八章 信息论方法在分子反应动力学中的应用 § 8.1 信息论方法概要  
§ 8.2 产物电子激发态分支比的计算 § 8.3 惊异度与熵亏 § 8.4 线性惊异模型下的熵亏第九章 研究分子  
碰撞的一些简化模型 § 9.1 表达产物分布的统计动力学方法 § 9.2 电子跃迁及鱼叉模型 § 9.3 脉冲光  
解模型 § 9.4 光学模型 § 9.5 DIPR、DIP模型 § 9.6 常产物排斥模型 § 9.7 原子-分子散射体系的跃迁矩  
阵元 § 9.8 解释直接反应的瞬时碰撞反应模型第十章 分子间与分子内传能 § 10.1 T-T传能 § 10.2 R-T传  
能与R-R传能 § 10.3 振动传能 § 10.4 分子传能与CO<sub>2</sub>激光器工作原理 § 10.5 电子能级传递第十一章 分  
子反应动力学的非绝热量子含时波包理论 § 11.1 化学反应的绝热及非绝热效应 § 11.2 非绝热量子含  
时波包理论 § 11.3 非绝热量子含时波包理论在化学反应中的应用附录 关于立体动力学参考文献

<<势能面与分子碰撞理论>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>