

# 《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

出版社：吉林大学出版社

作者：韩克利,孙本繁

页数：267

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《势能面与分子碰撞理论》

## 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，这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 $A+B \rightarrow AB+C$ 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  $\nu$  个核和N个电子所组成的相互作用体系，利用Born-Oppenheimer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。

## 书籍目录

导论	
第一章势能面	2
~ 1.1 Bom-Oppenheimer 定理(或近似)——引出势能面概念	2
~ 1.2 势能面的从头算法	3
~ 1.3 势能面计算的半理论方法	8
~ 1.4 半经验方法—DIM 方法	9
~ 1.5 经验方法及PES的拟合形式——为了散射动力学计算	10
~ 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(共线同体系)	14
~ 1.8 反应途径解析	14
~ 1.9 应用突变理论研究势能剖面曲线的拓扑性质	17
第二章双体弹性碰撞的量子理论	20
第三章非弹性散射(激散发射)	24
第四章量子反应动力学	39
~ 4.1 n 个粒子的几率流密度	39
~ 4.2 单粒子被一个一维势阱或势垒的散射	45
~ 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	55
~ 4.4 三原子体系共线反应散射——形式与数值方法	60
~ 4.5 三原子三维反应散射	73
~ 4.6 平面三原子体系量子力学反应散射理论	81
~ 4.7 超柱坐标下的双原子·双原子反应散射理论	96
第五章处理弹性碰撞的经典理论	102
第六章准经典碰撞理论	110
~ 6.1 理论方法——以三原子体系为例	110
~ 6.2 计算方法	116
~ 6.3 F + H <sub>2</sub> 反应散射内态角分布Monte Carlo 计算结果	118
~ 6.4 Ba + 正澳代烧炬反应动力学准经典轨线研究	119
第七章四中心碰撞的准经典轨迹研究	139
第八章信息论方法在分子反应动力学中的应用	145
~ 8.1 信息论方法概要	145
~ 8.2 产物电子激发态分支比的计算	147
~ 8.3 惊异度与情亏	150
~ 8.4 线性惊异模型下的情亏	151
第九章研究分子碰撞的一些简化模型	154
~ 9.1 表达产物分布的统计动力学方法	154
~ 9.2 电子跃迁及鱼叉模型	158
~ 9.3 脉冲光解模型	159
~ 9.4 光学模型	159
~ 9.5 DIPR-DIP 模型	159
~ 9.6 常产物排斥模型	160
~ 9.7 原子·分子散射体系的跃迁矩阵元	162
~ 9.8 解释直接反应的瞬时碰撞反应模型	167
第十章分子间与分子内传能	176
~ 10.1 T-T 传能	176
~ 10.2 R-T 传能与R-R 传能	177
~ 10.3 振动传能	178
~ 10.4 分子传能与CO <sub>2</sub> 激光器工作原理	179

# 《势能面与分子碰撞理论》

~ 10.5 电子能级传递.....	181
第十一章分子反应动力学的非绝热量子含时波包理论.....	219
~ 11.1 化学反应的绝热及非绝热效应.....	220
~ 11.2 非绝热量子含时波包理论.....	224
~ 11.3 非绝热量子含时波包理论在化学反应中的应用.....	229
附录关于立体动力学.....	239
参考文献.....	262

# 《势能面与分子碰撞理论》

## 精彩短评

- 1、非常好的学术专著
- 2、韩老师的好书，对理论的人不错。
- 3、书很难看懂啊
- 4、值得推荐！对于研究分子反应动力学很有帮助。

# 《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：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)