

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
<i>Литература</i>	10
Глава 1	
Почему именно элементарный процесс химического превращения в газе?	11
<i>Литература</i>	16
Глава 2	
Характеристики элементарных бимолекулярных реакций	17
2.1. Упругое рассеяние сферически симметричных частиц	17
2.2. Сечения и константы скорости бимолекулярных химических реакций	23
2.3. Модель поглощающей сферы	32
2.4. Экспериментальные данные по равновесным константам скорости и модель поглощающей сферы	37
Задачи	43
<i>Литература</i>	54
Глава 3	
Электронно-адиабатическое приближение и квантовые состояния двухатомной молекулы	55
3.1. Исключение электронных степеней свободы — электронно-адиабатическое приближение	55
3.2. Потенциальные кривые двухатомной молекулы. Представление о неадиабатических переходах	61
3.3. Квантовые числа, характеризующие состояние стабильных двухатомных молекул	69
Задачи	79
<i>Литература</i>	86



Глава 4

Поверхности потенциальной энергии для систем, в которых имеет место химическая реакция	87
4.1. Приближение Гайтлера—Лондона	87
4.2. Происхождение потенциального барьера — формула Лондона для системы трех атомов водорода	94
4.3. Метод Лондона—Эйринга—Поляни—Сато и общая характеристика поверхностей потенциальной энергии	106
Задачи	120
Литература	128

Глава 5

Метод переходного состояния. Классическая теория	129
5.1. Формулировка метода переходного состояния в рамках классической механики	129
5.2. Вариационный метод переходного состояния	147
Задачи	152
Литература	159

Глава 6

Метод переходного состояния. Квантовая теория	161
6.1. Типы квантовых эффектов в методе переходного состояния	161
6.2. Туннелирование и надбарьерное отражение при прохождении потенциального барьера	166
6.3. Квантование уровней энергии переходного комплекса и адиабатический метод переходного состояния	182
Задачи	193
Литература	200

Глава 7

Применение метода переходного состояния к расчету термических констант скорости конкретных систем	201
7.1. Стерический множитель в константах скорости прямых реакций	201
7.2. Реакция атома с двухатомной молекулой, идущая через линейный переходный комплекс	205
7.3. Метод переходного состояния и эксперимент для конкретных реакций атома с двухатомной молекулой	218
7.3.1. Реакция H с H_2	218
7.3.2. Реакция O с H_2	223
Задачи	228
Литература	241



Глава 8	
Динамика прямых бимолекулярных реакций	243
8.1. Микроскопические константы скорости реакции атома с двухатомной молекулой	243
8.2. Колебательные распределения продуктов экзотермической реакции атома с двухатомной молекулой	247
8.3. Динамика экзотермических реакций атома с двухатомной молекулой	258
8.4. Колебательно-адиабатическая модель прямых термонеutralных реакций на примере реакции $\text{H} + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}$	271
Задачи	276
Литература	280
Глава 9	
Статистическая теория бимолекулярных реакций, идущих через промежуточный комплекс	281
9.1. Концепция промежуточного комплекса	281
9.2. Сечения и константы скорости бимолекулярных реакций, идущих через промежуточный комплекс	290
9.3. Расчет микроканонической константы скорости распада промежуточного комплекса методом переходного состояния	301
Задачи	315
Литература	321
Глава 10	
Применение статистической теории к анализу конкретных идущих через промежуточный комплекс реакций	322
10.1. Характерные свойства микроканонической константы скорости распада промежуточного комплекса	322
10.2. Реакции соединения	331
10.3. Процессы химической активации	344
10.3.1. Конкуренция распада промежуточного комплекса на продукты и его стабилизации	345
10.3.2. Конкуренция распада промежуточного комплекса на продукты и его распада на реагенты	350
Задачи	355
Литература	362
Приложение I	
Единицы физических величин	363
Литература	370



Приложение II

Классификации газозавных химических реакций	371
Классификация реакций с точки зрения формальной кинетики	371
Реакции первого порядка	371
Реакции второго порядка	371
Реакции третьего порядка	372
Газо-кинетическая классификация реакций	372
Мономолекулярные реакции	372
Бимолекулярные реакции	373
Тримолекулярные реакции	373
Химическая классификация	374
Двухцентровые реакции	374
Трехцентровые реакции	375
Четырехцентровые реакции	376

Приложение III

Принципы, лежащие в основе приближенного анализа электронного уравнения Шредингера для молекулярных систем	377
<i>Литература</i>	<i>384</i>

Приложение IV

Структура и квантовые числа атома	385
--	------------

Приложение V

Неадиабатические переходы между пересекающимися электронными термами на примере диссоциации молекулы KCl	390
<i>Литература</i>	<i>395</i>

Приложение VI

Химическое равновесие в идеальных газах	396
--	------------