

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	6
Глава I. Метод переходного состояния	9
§ 1. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии	9
§ 2. Основные предположения метода переходного состояния. Вывод формулы для скорости элементарного процесса	15
§ 3. Надбарьерное отражение и туннельные поправки	27
§ 4. Квантовые статистические суммы и числа симметрии	31
§ 5. Изотопический эффект	36
§ 6. Принцип детального равновесия и метод переходного состояния	42
Глава II. Обмен колебательной и поступательной энергий при молекулярных столкновениях	48
§ 7. Общие замечания об обмене энергии при молекулярных столкновениях	48
§ 8. Модель гармонического осциллятора с внешней силой	58
§ 9. Колебательные переходы между нижними уровнями двухатомных молекул в невырожденном электронном состоянии	63
§ 10. Колебательная релаксация кислорода и азота	82
§ 11. Сильная связь колебаний с поступательным движением	87
§ 12. Резонансная передача колебательной энергии	95
§ 13. Обмен энергии при столкновениях многоатомных молекул	98
Глава III. Обмен электронной, колебательной и поступательной энергий при молекулярных столкновениях	102
§ 14. Классификация неадиабатических переходов	102
§ 15. Линейная модель. Формула Ландау — Зинера	110
§ 16. Обобщения линейной модели	119
§ 17. Модель нелинейных термов	125

§ 18. Неадиабатические процессы при атомных столкновениях	133
§ 19. Неадиабатические процессы при столкновениях атомов с двухатомными молекулами	148
§ 20. Колебательные переходы между нижними уровнями двухатомных молекул в вырожденном электронном состоянии	165
§ 21. Колебательная релаксация окиси азота	174
Глава IV. Мономолекулярные реакции	178
§ 22. Термический распад и изомеризация молекул как мономолекулярные реакции	178
§ 23. Зависимость константы скорости от давления. Механизм сильных активирующих столкновений	180
§ 24. Модель Слейтера	192
§ 25. Модель Касселя	206
§ 26. Влияние ангармоничности на скорость реакции	215
§ 27. Неадиабатические реакции	224
Глава V. Статистическая теория реакций	234
§ 28. Основные предположения статистической теории	234
§ 29. Гармоническая модель активной молекулы	240
§ 30. Ангармоническая модель активной молекулы	249
§ 31. Статистическая теория с учетом сохранения углового момента	253
§ 32. Изотопический эффект	266
§ 33. Применение статистической теории к термическим реакциям	268
Глава VI. Диффузионная теория реакций	277
§ 34. Диффузия в фазовом пространстве	277
§ 35. Диффузия по энергетическим состояниям	287
§ 36. Релаксация и прохождение частицы через потенциальный барьер	292
§ 37. Туннельные переходы в двойной потенциальной яме	298
§ 38. Случайные блуждания по дискретным уровням энергии	303
§ 39. Механизм активации и неравновесные функции распределения в мономолекулярных реакциях	308
Глава VII. Диссоциация двухатомных молекул и рекомбинация атомов	314
§ 40. Равновесная теория распада и рекомбинации	314
§ 41. Вклад различных степеней свободы диссоциирующей молекулы в константу скорости распада	319
§ 42. Вариационная теория диссоциации и рекомбинации	325
§ 43. Колебательная релаксация двухатомных молекул	332

§ 44. Неравновесная теория диссоциации и рекомбинации	340
§ 45. Связь констант скоростей диссоциации и рекомбинации. Влияние релаксации на скорость реакции	350
§ 46. Термическая диссоциация кислорода	353
Глава VIII. Бимолекулярные реакции	356
§ 47. Обмен как бимолекулярная реакция	356
§ 48. Поверхности потенциальной энергии бимолекулярных реакций	359
§ 49. Равновесная теория	373
§ 50. Статистическая теория	377
§ 51. Теория прямых реакций	387
§ 52. Динамика реакций обмена	397
§ 53. Нарушение равновесного распределения в бимолекулярных реакциях	408
Приложение. Проблемы элементарных процессов с термических газовых реакциях	418
Литература	434
Принятые обозначения	452