

<<多原子复杂体系反应动力学的理论与>>

图书基本信息

书名：<<多原子复杂体系反应动力学的理论与应用研究>>

13位ISBN编号：9787561457702

10位ISBN编号：7561457707

出版时间：2012-4

出版时间：四川大学出版社

作者：张雷，罗平亚 著

页数：263

字数：330000

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>

## <<多原子复杂体系反应动力学的理论与>>

### 内容概要

《多原子复杂体系反应动力学的理论与应用研究（英文版）》作为地球大气层的重要组成部分，臭氧（O<sub>3</sub>）分子对地球上的生态环境有非常重要的保护作用。系统地了解其特性，进而建立大气中臭氧的反应机理及动力学模型是世界各国重点关注的问题之一（在国家重点基础研究发展计划中，已将研究大气平流层动力-物理-化学过程与变化趋势及臭氧层变化与平流层环境预测列为2009年度重要支持方向）。该动力学模型的建立涉及大气中大量的多原子碰撞反应。其中两个代表性的反应系列就是大气平流层中臭氧消耗的HO<sub>x</sub>。

## 作者简介

罗平亚 (1940.06-), 男, 教授、博士生导师, 中国工程院院士, 四川省学术和技术带头人, 享受国务院政府特殊津贴专家, 国家级有突出贡献的中青年专家, “孙越崎能源大奖”获得者。国务院学位委员会第三届、第四届学科评议组成员、四川省学位委员会委员长期从事石油天然气钻井和开发方面的研究与教学工作, 是我国油田化学及与之相关的石油工程技术领域方面的著名专家。发表科研论文100余篇, 主持、参与和完成40多项国家和省部级科研项目, 获省部级以上奖30余项 (其中国家级奖7项, 省部级一等奖13项), 出版专著6部, 培养硕士、博士100多人。

张雷 (1967.02-), 男, 教授、博士生导师, 葡萄牙科英布拉大学理论与计算化学专业博士 (后) 四川省学术和技术带头人, 国家自然科学基金委地球科学部、化学科学部项目评议人入选2007年度四川省杰出青年学科带头人培养资助计划主要从事理论与计算化学、应用化学、化学工程等学科领域研究、教学工作发表论著50余篇, 其中在Phys. Chem. Chem. Phys., J Phys. Chem. A等国际知名学术期刊上发表SCI收录论文20余篇, 主持国家自然科学基金等国家级项目2项, 主持四川省青年科技基金等省部级基金项目6项, 主研同973计划项目等国家级项目7项。

书籍目录

Introduction

Bibliography

Part Theoretical Framework

Chapter 1 Potential Energy Surfaces

1.1 Born-Oppenheimer approximation

1.1.1 The total Hamiltonian

1.1.2 Adiabatic representation

1.1.3 Diabatic representation

1.1.4 Diabatic-to-Adiabatic transformation

1.1.5 Two-State model

1.2 The solution of the electronic problem

1.3 Abinitio potentialenergy surfaces

1.3.1 Correlation energy partitioning

1.3.2 Semiempirical correction of ab initio energies

1.4 Semiempirical global potential energy surfaces

1.4.1 Diatomics-in-molecules theory

1.4.2 The double many-body expansion method

1.4.3 Energy-switching scheme for spectroscopically accurate

functions Bibliography

Chapter 2 Reaction Dynamics

2.1 Classical scattering

2.1.1 Molecule collision theory

2.1.2 Statistical averaging

2.2 The quasiclassical trajectory method

2.2.1 Classical Hamiltonian mechanics

2.2.2 Coordinate systems and transformations

2.2.3 Selection of initial states

2.2.4 Integration of the equations of motion

2.2.5 Analysis of finalstates

2.2.6 Treatment of the zero-point energy problem

2.3 Quantum reaction dynamics: a synopsis

2.3.1 Theinteraction picture

2.3.2 Time-dependent approaches

2.3.3 Time-independent approaches

2.3.4 Reduced dimensionality approaches Bibliography

Part Case Studies

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>