

目 次

はじめに	ix
謝辞	xiii
第 1 章 化学反応の分子レベルでの理解	1
1.1 分子反応動力学とは何か？	2
1.2 例：発熱反応におけるエネルギー分配	4
付録：単位	21
演習問題	23
注	25
第 2 章 分子衝突	29
2.1 分子は有限の大きさを持つ	30
2.2 分子の接近運動	47
演習問題	64
注	67
第 3 章 反応性分子衝突序論	71
3.1 化学反応の速度と断面積	71
3.2 反応性 2 体衝突の微視的動力学	82
演習問題	100
注	107
第 4 章 散乱実験と衝突過程の動力学	109
4.1 構造のない粒子の古典散乱	109
4.2 相互作用ポテンシャルを探る手段としての弾性散乱	118
4.3 量子散乱理論の初歩	125
4.4 反応性分子衝突の角度分布	138
演習問題	144
注	146
第 5 章 多原子分子の動力学入門	149
5.1 ポテンシャルエネルギー関数と化学反応	151
5.2 古典軌跡に基づく反応動力学	172
5.A 補足：モンテカルロサンプリング	177

5.3 化学変化の動力学とエネルギー	180
5.B 補足：質量加重座標系	192
演習問題	196
注	200
第6章 分子構造と反応速度	205
6.1 遷移状態理論：障壁通過の反応速度	206
6.A 補足：状態密度と分配関数	218
6.2 RRKM 理論と単分子反応の速度	220
6.3 終状態選択と終状態分布	235
6.B 補足：速度ベクトル分布の定量的解析	242
6.4 終状態分布の特徴と化学反応を起こすためのエネルギー分配の要件	245
演習問題	261
注	265
第7章 光による状態選択的化学：遷移状態へ至る道筋	271
7.A 補足：梯子模型	282
7.1 2 原子分子の光励起および光検出	285
7.2 光解離動力学	294
7.3 2 分子分光学	317
7.4 量子制御	328
演習問題	332
注	337
第8章 リアルタイムに見る化学	343
8.1 化学結合の解離と形成の観測	347
8.2 化学変換	353
8.3 極短パルスによる化学反応の制御	358
問題	362
注	364
第9章 状態変化を伴う衝突：分子エネルギー移動	367
9.1 振動エネルギー移動	375
9.2 エネルギー移動の本質の理解	384
9.3 電子エネルギー移動	391
演習問題	403
注	406
第10章 立体動力学	409
10.1 反応試薬分子が接近する際の姿勢制御	410
10.2 生成物の偏向状態の解析	417
10.3 ベクトル相関	434
演習問題	439
注	441
第11章 凝縮相の動力学	443
11.1 溶媒和	446
11.2 障壁通過の動力学	467

11.3 界面	476
11.4 溶液中の化学反応性	482
演習問題	487
注	490
第12章 気体-固体界面の動力学と化学反応	493
12.1 表面散乱	496
12.2 表面の動力学	500
12.3 表面反応のカオスと時空パターン形成	509
演習問題	513
注	515
参考文献	519
訳者あとがき	553
索引	555