

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора переиздания	3
Биографический очерк	5
Предисловие	17
Глава I. Статистическая теория	19
§ 1. Введение	19
§ 2. Некоторые сведения о природе химических сил.	20
§ 3. Введение в статистический метод. Принцип Паули	26
§ 4. Кристаллическая решетка металлов	31
§ 5. Теория Томаса–Ферми	35
§ 6. Решение вариационных задач по способу Ритца	43
§ 7. Теория возмущений	49
§ 8. Валентные электроны в статистической теории.	53
§ 9. Наглядное истолкование химических сил.	57
Литература	62
Глава II. Уравнение Шредингера	64
§ 10. Уравнение Шредингера для одного электрона	64
§ 11. Свободно движущийся электрон.	69
§ 12. Прохождение через потенциальный барьер (туннельный эффект).	72
§ 13. Потенциальный ящик	78
§ 14. Уравнение Шредингера в сферических координатах	88
§ 15. Ротатор	92
§ 16. Обобщенный атом водорода	95
§ 17. Периодическая система.	101
Литература	107
Глава III. Математический аппарат квантовой механики	109
§ 18. Общее уравнение Шредингера	109
§ 19. Ортогональные системы собственных функций	112
§ 20. Разложение по собственным функциям. Матрицы	115
§ 21. Переход от задачи многих электронов к задаче одного электрона.	116
§ 22. Вычисление возмущений (без вырождения)	119
§ 23. Вычисление возмущений с вырождением	122
§ 24. Физическое значение коэффициентов и элементов матриц	124
§ 25. Вычисление возмущений с амплитудами, меняющимися во времени	125
§ 26. Пример квантовомеханического запрета перехода (орто- и параводород)	130
Литература	134
Глава IV. Химическая связь как проблема одного электрона	135
§ 27. Ион H_2^+	135
§ 28. Молекула водорода H_2	143
§ 29. Несимметричная двухатомная молекула	146
§ 30. Схема валентности для гомеоплярных двухатомных молекул	149
§ 31. Многоатомные молекулы.	154
§ 32. Валентная система в органической химии	159
§ 33. Проблема свободного вращения	166
Литература	171
Глава V. Ван-дер-ваальсовы силы	173
§ 34. Поляризуемость атома водорода	173
§ 35. Силы, действующие между двумя удаленными атомами водорода.	178
§ 36. Произвольный атом или молекула в однородном поле.	182
§ 37. Энергия твердого диполя, вращающегося в электрическом поле.	191

§ 38. Ван-дер-ваальсово взаимодействие произвольных молекул	194
§ 39. Аддитивность дисперсионных сил.	200
§ 40. Ван-дер-ваальсовы силы в газах.	202
§ 41. Применение ван-дер-ваальсовых сил в теории кристаллической решетки	205
§ 42. Теория сил адсорбции.	210
§ 43. Границы приложимости закона $\frac{1}{r^6}$ для межмолекулярных сил	212
§ 44. Силы, заметные на еще больших расстояниях между возбужденными молекулами.	216
Литература.	218
Глава VI. Вариационный метод	220
§ 45. Вариационный принцип и уравнение Шредингера	220
§ 46. Вариационный метод в применении к одному или двум электронам в центральном поле	223
§ 47. Применение вариационного метода к более тяжелым атомам.	230
§ 48. Поляризуемость по вариационному методу.	232
§ 49. Дисперсионные силы по вариационному методу	239
§ 50. Проблема двух центров.	243
§ 51. Метод Хартри–Фока	248
§ 52. Комбинированный приближенный способ расчета энергии в задаче многих электронов	254
§ 53. Применение комбинированного приближенного метода.	258
§ 54. Резонанс типов валентности	262
Литература.	270
Глава VII. Общая теория возмущения многоэлектронной задачи	274
§ 55. Молекула H_2 по Гайтлеру и Лондону	274
§ 56. Некоторые сведения о спине, принципе Паули и антисимметрии	281
§ 57. Оператор перестановки	286
§ 58. Введение спин-амплитуд	289
§ 59. Спин-инварианты.	293
§ 60. Общая теория возмущений многоэлектронной задачи.	297
§ 61. Вывод уравнений возмущения для валентных электронов (без учета остовов).	302
§ 62. Влияние замкнутых оболочек.	308
§ 63. Улучшенный учет влияния атомных остовов.	313
§ 64. Задачи двух–четырёх электронов	316
§ 65. Проблема шести электронов	321
§ 66. Молекулы NH_3 и NH	324
Литература.	332
Глава VIII. Приближенные методы и применения теории многоэлектронной задачи.	335
§ 67. Локализация валентностей при прочной межатомной спиновой связи	335
§ 68. Прочная внутриатомная спиновая связь.	341
§ 69. Пределы применения различных приближенных методов	349
§ 70. Нелокализованные валентности бензола	354
§ 71. Ориентировочные сведения о валентных состояниях атома, содержащего s - и p -электроны	356
§ 72. Расчет валентных состояний p^2 , p^3 , p^4 с помощью спектральных данных	360
§ 73. Валентные q^4 -состояния атома C и более тяжелых атомов и ионов.	368
§ 74. Количественная теория локализованных p -валентностей.	378
§ 75. Количественная теория локализованных q -валентностей.	385
§ 76. Схема (расчета) энергии связи $\langle v \rangle$ органической химии	393

§ 77. Систематический расчет возмущений при наличии орбитальных вырождений	399
Литература	409
Глава IX. Движение атомов и их взаимодействие	412
§ 78. Запрет пересечения термов	412
§ 79. Адиабатические и диабатические движения атомов при классическом рассмотрении ядер	418
§ 80. Волново-механическая теория движения ядер в отсутствие процессов перехода	423
§ 81. Двухатомная молекула как негармонический осциллятор	428
§ 82. Теория энергии активирования химических реакций	441
§ 83. Абсолютные значения скоростей реакций при классическом рассмотрении движения ядер	451
§ 84. Туннельный эффект при адиабатических реакциях	460
§ 85. Адиабатическое и диабатическое движения атомов при волново-механическом рассмотрении ядер	469
Литература	477
Глава X. Математическое дополнение	480
§ 86. Системы координат	480
§ 87. Основные интегралы с экспоненциальной функцией	483
§ 88. Интегралы задачи одного центра	495
§ 89. Интегралы задачи двух центров в проблеме одного электрона	498
§ 90. Взаимодействие двух облаков зарядов в задаче двух центров	503
Литература	509
Дополнение	511
§ 91. Обмен в случае плоских волн	511
§ 92. Улучшенные выражения для потенциальной энергии атома Томаса–Ферми	515
§ 93. Поправки на кинетическую энергию в теории Томаса и Ферми	520
§ 94. Теория металлической связи	522
Дополнительная литература	527