

《现代分子光化学》

图书基本信息

书名：《现代分子光化学》

13位ISBN编号：9787122231208

出版时间：2015-10-1

作者：Nicholas J. Turro, V. Ramamurthy, J. C. Scaiano

页数：392

译者：吴骊珠, 佟振合

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu111.com

《现代分子光化学》

内容概要

本书英文版由国际著名光化学家N.J.Turro、V.Ramamurthy和J.C.Scaiano撰写并于2009年出版。该书完整地介绍了有机光化学的基础知识，包括光物理和有机光化学反应，内容丰富，论述条理清晰。它不仅为初学者介绍了现代分子光化学的基础，也为专家学者提供了详尽的参考资料，是从事光化学领域教学与研究工作者的必备参考书籍。

早在1987年，中国科学出版社曾组织翻译出版过Turro教授所著的《现代分子光化学》一书（英文版1978年出版）。虽然30年前出版的这本译著积极推动了我国光化学研究的发展，但由于当时有关电子转移理论以及超分子化学理论处于成长与发展阶段，相关理论都未成为书中的重要组成部分。因此，Turro、Ramamurthy和Scaiano教授撰写了该图书，增加了30多年来光化学理论的发展与应用，弥补了之前的缺憾。同时，该书在结构编排上也做了较大的变动，许多理论用图形给出了清晰的描述，有助于读者理解相关内容。

本书为该系列的第一部分，原理篇。详细介绍了分子的基态和激发态的电子构型、电子自旋和振动能级，讨论了光和物质的相互作用，深入论述了激发态失活过程，包括辐射跃迁（荧光和磷光）、非辐射跃迁（内转换和系间窜越）以及能量传递和电子转移过程，内容深入浅出，层次分明，使读者，特别是对现代量子力学不够熟悉的化学工作者能够清晰了解现代分子光化学的基础理论。

作者简介

Turro教授生前任职于美国哥伦比亚大学，是美国科学院院士。他是超分子化学、有机光化学、分子光谱学、主-客体化学、化学反应的磁场效应等领域的领导者和开拓者。

Ramamurthy教授现任职于美国佛罗里达州迈阿密大学。他在固体化学、超分子化学以及有机光化学等领域做出了杰出贡献。

Scaiano教授现任职于加拿大渥太华大学。他在光化学及物理有机化学等领域的杰出工作受到了同行的广泛认可。

吴骊珠，中科院理化技术研究所，研究员，博士生导师，主持超分子光化学研究室的工作。

书籍目录

第1章 绪论

第2章 激发态的电子构型、振动及自旋

第3章 能态间的跃迁: 光物理过程

第4章 辐射跃迁

第5章 非辐射跃迁

第6章 分子光化学原理

第7章 能量转移和电子转移

(2) 反应篇

第8章 有机光化学

第9章 羰基化合物的光化学

第10章 烯烃光化学

第11章 烯酮和二烯酮的光化学

第12章 芳香化合物的光化学

第13章 超分子有机光化学: 通过分子间相互作用控制有机光化学和光物理

第14章 分子氧和有机光化学

第15章 有机光化学反应归纳

本册目录

第1章 绪论1

1.1 什么是分子有机光化学? 1

1.2 通过分子结构的形象化及其转换动态学来学习分子有机光化学2

1.3 为什么要学习分子有机光化学? 3

1.4 图像化表示的价值和科学概念的形象化4

1.5 分子有机光化学的科学范式5

1.6 实验研究和理解分子有机光化学的指导性样本6

1.7 分子有机光化学的范式6

1.8 可能的、似乎可能的、最有可能的光化学过程的指导性范式7

1.9 通过分子有机光化学的范式来回答几个重要的问题8

1.10 从全局性范式到日常可用的工作范式8

1.11 单重态、三重态、双自由基和两性离子: 经由^{*}R到P光化学途径的关键结构11

1.12 能态图: 电子和自旋异构体13

1.13 分子光化学势能面的描述16

1.14 结构、能量和时间: 光化学过程中分子水平的基准和校正点20

1.15 分子能量中的校正点和数值基准21

1.16 光子计数22

1.17 计算1mol波长为 频率为 的光子能量23

1.18 电磁光谱中光子能量的范围23

1.19 分子尺寸和时间尺度的校正点与数值基准26

1.20 本书的计划29

参考文献30

第2章 激发态的电子构型、振动及自旋32

2.1 通过分子有机光化学范式来考察电子激发态的结构32

2.2 分子波函数和分子结构34

2.3 Born-Oppenheimer 近似: 分子波函数及能量近似的起点36

2.4 近似波函数的重要定性特征38

2.5 从量子力学的假设到对分子结构的观察: 期望值与矩阵元39

2.6 量子力学波函数、算符及矩阵元的运用精髓41

2.7 从原子轨道, 到分子轨道, 到电子构型, 到电子态41

- 2.8 基态及激发态的电子构型42
- 2.9 从电子构型构建电子态45
- 2.10 从电子激发构型和Pauli原理构建激发单重态和三重态45
- 2.11 单重态和三重态的特征构型：缩写符号46
- 2.12 *R单重态和三重态的电子能差：电子相关性与电子交换量47
- 2.13 相同电子构型下电子激发态(*R)单重态与三重态相对能量及单重态-三重态能隙的评价48
- 2.14 分子体系中的单重态-三重态裂分样本50
- 2.15 双自由基活性中间体单重态与三重态之间的电子能差：自由基对I(RP)和双自由基I(BP)53
- 2.16 振动波函数模型：经典谐振子56
- 2.17 经典谐振子的量子力学版本60
- 2.18 量子力学谐振子的振动能级62
- 2.19 量子力学谐振子的振动波函数：双原子分子波函数的形象化63
- 2.20 谐振子模型的一级近似：非谐振子64
- 2.21 对于采用波函数来建立量子直觉66
- 2.22 电子自旋：形象化自旋波函数的模型66
- 2.23 电子自旋的矢量模型68
- 2.24 矢量的重要性质68
- 2.25 电子自旋的矢量表示68
- 2.26 自旋多重态：电子自旋的允许取向70
- 2.27 两个耦合电子自旋的矢量模型：单重态与三重态71
- 2.28 不确定原理和电子自旋的可能取向锥73
- 2.29 两个1/2自旋耦合的可能取向锥：以单重态和三重态取向锥为基础对自旋态的相互转换进行形象化75
- 2.30 因自旋角动量而建立起自旋角动量与磁矩间的联系75
- 2.31 角动量和磁矩的关系：电子角动量的物理模型76
- 2.32 电子在玻尔轨道上的磁矩76
- 2.33 磁矩与电子自旋间的关系78
- 2.34 经典磁体在外加磁场下的磁能级79
- 2.35 无耦合磁场下的量子磁体81
- 2.36 磁场中的量子力学磁体：为外加磁场下的自旋构建磁态能级图81
- 2.37 单电子自旋及两个耦合电子自旋的磁能级图82
- 2.38 包括电子交换相互作用J的磁能级图83
- 2.39 两个磁偶极间的相互作用：磁相互作用能量的取向和距离依赖性84
- 2.40 概要：电子、振动、自旋的结构和能量86
- 参考文献86
- 第3章 能态间的跃迁：光物理过程87
 - 3.1 能态间的跃迁87
 - 3.2 状态间模式转换的起始点89
 - 3.3 经典的化学动态学：一些初步的评述90
 - 3.4 量子动态学：态与态间的跃迁90
 - 3.5 扰动理论90
 - 3.6 跃迁概率选择规则的宗旨94
 - 3.7 作为电子跃迁触发的核的振动运动；电子振动耦合和电子振动态：核运动对于电子能量和电子结构的影响95
 - 3.8 振动对于电子态间跃迁的影响；Franck-Condon原理98
 - 3.9 Franck-Condon原理对辐射跃迁的经典和半经典谐振子模型99
 - 3.10 Franck-Condon原理及辐射跃迁的量子力学解释102
 - 3.11 Franck-Condon原理和非辐射跃迁104
 - 3.12 在不同多重性自旋态间的辐射和非辐射跃迁108

- 3.13 自旋动态学：角动量矢量的经典进动109
- 3.14 在可能取向的锥体中量子力学磁体的进动112
- 3.15 自旋进动的重要特征113
- 3.16 耦合磁场强度和进动速度间的一些定量基准的关系114
- 3.17 自旋态间的跃迁：磁能及相互作用116
- 3.18 在电子自旋耦合中，电子交换 (J) 的作用116
- 3.19 自旋与磁场耦合：自旋跃迁和系间窜越的图像化117
- 3.20 磁态间跃迁的矢量模型119
- 3.21 自旋-轨道耦合：有机分子中诱导自旋变化的主要机制120
- 3.22 两个自旋与第三个自旋的耦合： $T_+ S$ 和 $T_0 S$ 跃迁126
- 3.23 涉及两个相关自旋的耦合： $T_0 S$ 跃迁128
- 3.24 双自由基I(D)中的系间窜越：自由基对，I(RP) 和双自由基I(BR)129
- 3.25 I(D)中的自旋-轨道耦合：相关轨道取向的规则129
- 3.26 柔性双自由基的系间窜越132
- 3.27 各种跃迁的共同特征135
- 参考文献135
- 第4章 辐射跃迁136
 - 4.1 有机分子的光吸收和光发射136
 - 4.2 光的本质：系列范式的变迁136
 - 4.3 黑体辐射和“紫外灾难”及光能的普朗克量子化：能量量子化138
 - 4.4 光电效应与爱因斯坦的光量子化——光的量子：光子139
 - 4.5 如果光波具有粒子的性质，那么粒子是否也具有波动的性质呢？——德布罗意统一物质和光141
 - 4.6 有机分子的吸收和发射光谱：分子光物理的态能级图142
 - 4.7 有机分子的吸收和发射光谱实验：基准143
 - 4.8 光的本质：从粒子到波动，再到波动的粒子145
 - 4.9 光吸收的图像表达法145
 - 4.10 电子与光的电力和磁力间的相互作用146
 - 4.11 光与分子相互作用的机制：光作为一种波动147
 - 4.12 光和物质相互作用的样本：氢原子148
 - 4.13 对氢原子与氢分子光吸收的经典叙述到量子力学的叙述149
 - 4.14 光子，一种无质量的试剂152
 - 4.15 光谱实验值与理论值的关系154
 - 4.16 振子强度概念155
 - 4.17 振子强度的经典概念与量子力学瞬时偶极矩间的关系156
 - 4.18 μ_{k0} , e_0 , $1/P/2$ 与 μ 间关系的例子157
 - 4.19 与发射和吸收光谱相关的定量理论实验测试159
 - 4.20 吸收和发射光谱的形状160
 - 4.21 Franck-Condon原理和有机分子的吸收光谱163
 - 4.22 Franck-Condon原理和发射光谱166
 - 4.23 轨道组态混合与多重性混合对辐射跃迁的影响167
 - 4.24 有机分子对光的吸收或发射的实例170
 - 4.25 吸收、发射和激发光谱171
 - 4.26 辐射跃迁参数的数量级估计173
 - 4.27 发光 ($R \rightarrow R+h$) 量子产率178
 - 4.28 荧光量子产率的实验例子183
 - 4.29 从发射光谱测定ES和ET的“态能量”187
 - 4.30 自旋-轨道耦合和自旋禁阻的辐射跃迁188
 - 4.31 涉及多重性变化的辐射跃迁： $S_0 \rightarrow T(n, *)$ 和 $S_0 \rightarrow T(, *)$ 跃迁的样本189
 - 4.32 自旋禁阻辐射跃迁的实验样本： $S_0 \rightarrow T_1$ 吸收和 $T_1 \rightarrow S_0$ 的磷光辐射192

- 4.33 磷光量子产率 $P: T_1 \rightarrow S_0 + h\nu$ 过程194
- 4.34 在室温下流动溶液的磷光195
- 4.35 电子激发态的吸收光谱196
- 4.36 涉及两个分子的辐射跃迁：络合物和激基复合物的吸收197
- 4.37 基态的电荷转移吸收络合物的例子198
- 4.38 激基缔合物和激基复合物199
- 4.39 激基缔合物的样本：苊和芳香化合物203
- 4.40 激基复合物和激基复合物的发射205
- 4.41 扭曲的分子内电荷转移态 (TICT) 207
- 4.42 “上层”激发单重态和三重态的发射；萘的反常209
- 参考文献210
- 第5章 非辐射跃迁213
 - 5.1 非辐射跃迁是电子弛豫的一种形式213
 - 5.2 非辐射电子跃迁可看作是代表点在电子势能面上的运动214
 - 5.3 态与态间非辐射跃迁的波动力学解释217
 - 5.4 非辐射跃迁与Born-Oppenheimer近似失效221
 - 5.5 强避免与匹配势能面间的本质区别221
 - 5.6 接近于零级能面交叉的锥体交集221
 - 5.7 非辐射跃迁参数化模型的公式表述222
 - 5.8 通过振动运动及电子振动混合促进非辐射跃迁的图像化222
 - 5.9 系间窜越：通过自旋-轨道耦合促进非辐射跃迁及其图像化226
 - 5.10 分子中系间窜越的选择规则227
 - 5.11 分子结构与非辐射跃迁效率和速率间的关系：诱导电子非辐射跃迁的伸缩和扭曲机制231
 - 5.12 “油滑栓” (loose bolt) 和“自由转子”效应：促进体与接受体的振动232
 - 5.13 大能量间隔“匹配”面间的非辐射跃迁234
 - 5.14 影响振动弛豫速率的一些因素236
 - 5.15 从定量的发射参数来评估非辐射过程的速度常数238
 - 5.16 从光谱发射数据来评价光物理过程速率的例子240
 - 5.17 内转换 ($S_n \rightarrow S_1, S_1 \rightarrow S_0, T_n \rightarrow T_1$) 242
 - 5.18 *R 的激发态结构与内转换速率的关系243
 - 5.19 内转换 ($S_1 \rightarrow S_0$) 的能隙定律245
 - 5.20 内转换的氕代同位素试验246
 - 5.21 $S_n \rightarrow S_1$ 内转换反常减慢实例247
 - 5.22 $S_1 \rightarrow T_1$ 的系间窜越247
 - 5.23 $S_1 \rightarrow T_1$ 系间窜越与分子结构间的关系248
 - 5.24 $S_1 \rightarrow T_n$ 系间窜越的温度依赖性250
 - 5.25 系间窜越 ($T_1 \rightarrow S_0$) 250
 - 5.26 $T_1 \rightarrow S_0$ 系间窜越与分子结构间的关系250
 - 5.27 $T_1 \rightarrow S_0$ 系间窜越的能隙定律：氕同位素对系间窜越的影响251
 - 5.28 自旋禁阻非辐射跃迁的扰动252
 - 5.29 重原子效应对系间窜越的内扰动作用253
 - 5.30 系间窜越的外部扰动作用254
 - 5.31 非辐射跃迁与光化学过程间的关系255
 - 参考文献256
- 第6章 分子光化学原理259
 - 6.1 有机光化学反应导论259
 - 6.2 势能曲线和势能面261
 - 6.3 经典代表点在势能面上的运动262
 - 6.4 碰撞和振动对代表点在能面上运动的影响263

- 6.5 在势能面上的非辐射跃迁：从 $*R$ 到 P 过程中的能面极大、能面极小和漏斗264
- 6.6 有机光化学反应的范式264
- 6.7 以势能面为基础的有机光化学反应的一般性理论266
- 6.8 光化学反应中可能的分子结构和可能的反应路径267
- 6.9 从激发态能面到基态能面的“漏斗”的拓扑学：光谱极小、延伸的能面接触、能面的匹配、能面的交叉及分开267
- 6.10 从二维PE曲线到三维PE面：二维到三维的“跳跃”270
- 6.11 初始光化学过程中涉及的对应于面回避和面接触的漏斗270
- 6.12 “非交叉规则”及其违例：锥形交叉及其可视化271
- 6.13 锥体交叉的一些重要且独特的性质272
- 6.14 类双自由基结构及其几何构型276
- 6.15 从伸长的(键和扭曲的(键产生类双自由基结构278
- 6.16 由(键伸长和键的断裂产生类双自由基几何结构的范例：氢分子(键的伸长278
- 6.17 (键的扭转和断裂产生类双自由基几何学结构的范例：乙烯(键的扭曲281
- 6.18 前线轨道相互作用导向能面上的最低能量途径和能垒283
- 6.19 前线轨道的最大正重叠原理285
- 6.20 通过轨道相互作用的稳定性：基于最大正相重叠和最小能隙的选择规则285
- 6.21 有机光反应中常见的轨道相互作用286
- 6.22 从反应 $*R \rightarrow I$ 或 $*R \rightarrow F \rightarrow P$ 的轨道相互作用来选择反应坐标：涉及类双自由基中间体的协同光化学反应和光化学反应的范例288
- 6.23 电子轨道和态相关图289
- 6.24 光化学协同周环反应的范例：环丁烯的电环开环和1,3-丁二烯的闭环反应289
- 6.25 涉及以自由基为半充满分子轨道模型的前线轨道相互作用290
- 6.26 轨道和态的相关图293
- 6.27 选定反应坐标的电子轨道和态相关图的构建294
- 6.28 对于协同光化学周环反应的典型态相关图294
- 6.29 环丁烯和1,3-丁二烯电环反应的轨道和状态分类：一个协同反应的范例294
- 6.30 协同的光化学周环反应和锥体的交集297
- 6.31 非协同光反应的典型态相关图：含中间体(双自由基和两性离子)的反应297
- 6.32 固有的轨道相关图298
- 6.33 小势垒在决定光化学过程效率中的作用298
- 6.34 n, π^* 态光化学反应的范例299
- 6.35 对称面的假设：Salem图表300
- 6.36 n, π^* 态的 n 轨道引发的反应的态相关图：通过共平面反应坐标提取氢301
- 6.37 样本态相关图扩展到达的新境况303
- 6.38 酮的断裂的态相关图303
- 6.39 π, π^* 和 n, π^* 态可能的初级光反应标准组306
- 6.40 π, π^* 态可能的初级光化学反应特征306
- 6.41 n, π^* 态可能的特征初级光化学过程307
- 6.42 结论：能面可作为反应图表308
- 参考文献309
- 第7章 能量转移和电子转移310
 - 7.1 能量转移和电子转移概述310
 - 7.2 能量和电子转移的电子交换相互作用314
 - 7.3 能量转移和电子转移的“简易”机制318
 - 7.4 能量和电子转移的机制：相同点和不同点321
 - 7.5 偶极-偶极相互作用能量转移的图像化：发射天线与接收天线机制324
 - 7.6 偶极-偶极能量转移的Forster理论定量分析325
 - 7.7 kET与能量转移效率和给受体间距离RDA的关系328

- 7.8 偶极-偶极能量转移的实验测试330
- 7.9 电子交换过程：由碰撞和轨道重叠机制所引起的能量转移333
- 7.10 电子交换：能量转移的轨道重叠或碰撞机制334
- 7.11 导致激发态产生的电子转移过程335
- 7.12 三重态-三重态湮灭 (TTA)：通过电子交换相互作用能量转移的特例336
- 7.13 电子转移：机制和能量学原理338
- 7.14 电子转移的Marcus理论345
- 7.15 对电子转移反应坐标的进一步考察354
- 7.16 对光诱导电子转移Marcus反转区的实验证明356
- 7.17 一些证明Marcus理论的光诱导电子转移的例子358
- 7.18 长程电子转移359
- 7.19 长程电子转移的机理：通过空间和通过键的相互作用360
- 7.20 三重态-三重态能量转移和电子转移的定量比较362
- 7.21 分子内的电子、空穴以及三重态转移的关系363
- 7.22 通过柔性连接体连接的给体与受体间的光诱导电子转移363
- 7.23 溶液中自由扩散物种的Marcus反转区实验观测364
- 7.24 通过控制电子转移驱动力 (G) 的变化来控制电子转移分离的速度和效率365
- 7.25 Marcus理论在控制产物分布中的应用367
- 7.26 电荷转移到自由离子的结构连续性：激基复合物、接触的离子对、溶剂分离的离子自由基对以及自由的离子对369
- 7.27 激基复合物与接触的离子自由基对间的比较373
- 7.28 能量转移和电子转移的平衡375
- 7.29 能量转移的平衡375
- 7.30 基态下的电子转移平衡377
- 7.31 激发态的电子转移平衡378
- 7.32 电子转移反应导致激发态的生成：化学发光反应378
- 7.33 溶液中能量转移和电子转移过程的分子扩散作用379
- 7.34 通过扩散控制的能量转移样本380
- 7.35 对扩散控制过程速率常数的估算382
- 7.36 近程-扩散控制反应的实例：碰撞复合物的可逆生成385
- 7.37 笼效应386
- 7.38 扩散的距离-时间相互关系388
- 7.39 涉及荷电物种体系中的扩散控制389
- 7.40 概要390
- 参考文献391

《现代分子光化学》

精彩短评

1、不妨好好借鉴一下1987年的翻译版本。好好的内容真是做得一塌糊涂。

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：www.tushu111.com