

УДК 544:004.9
ББК 24.5в6
К20

Каплан И. Г.

К20 Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И. Г. Каплан ; пер. с англ. — 4-е изд., электрон. — М. : Лаборатория знаний, 2023. — 397 с. — Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". — Загл. с титул. экрана. — Текст : электронный.

ISBN 978-5-93208-648-3

Книга, написанная нашим соотечественником, профессором Автономного национального университета Мехико, содержит описание взаимодействий между молекулами на больших, средних и малых расстояниях, а также в многоэлектронных системах. Некоторые теоретические построения опубликованы впервые. Дан сравнительный анализ модельных потенциалов, используемых в современных квантово-химических расчетах и при компьютерном моделировании в физике, химии и молекулярной биологии. Рассмотрены многочастичные системы, для которых характерна неаддитивность силовых эффектов. В приложении приведены сведения из теории групп, векторного и тензорного исчисления и обзор методов неэмпирического исследования многоэлектронных систем.

Для химиков, молекулярных физиков и молекулярных биологов — научных сотрудников, преподавателей и студентов.

УДК 544:004.9
ББК 24.5в6

Деривативное издание на основе печатного аналога: Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И. Г. Каплан ; пер. с англ. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. — 394 с. : ил. — ISBN 978-5-94774-939-7.

В соответствии со ст. 1299 и 1301 ГК РФ при устранении ограничений, установленных техническими средствами защиты авторских прав, правообладатель вправе требовать от нарушителя возмещения убытков или выплаты компенсации

Copyright © 2006 John Wiley & Sons, Ltd.
The Atrium, Southern Gate, Chichester.
West Sussex PO19 8SQ, England.
All Rights Reserved. Authorized translation
from the English language edition published
by John Wiley & Sons, Ltd.
This EBook published under license
with the original publisher John Wiley & Sons, Inc.
© Перевод на русский язык, Лаборатория знаний,
2021

ISBN 978-5-93208-648-3

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие автора к русскому изданию	7
Предисловие к английскому изданию	9
Глава 1. Вводная глава	11
1.1 Предмет межмолекулярных взаимодействий и его особенности	11
1.2 Краткий исторический обзор	14
1.3 Концепция межатомных потенциалов и адиабатическое приближение	22
1.4 Общая классификация межмолекулярных взаимодействий	28
Литература	33
Глава 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественная картина	36
2.1 Прямые электростатические взаимодействия	36
2.1.1 Общие выражения	36
2.1.2 Мультипольные моменты	38
2.1.3 Мультиполь-мультипольное взаимодействие	46
2.2 Резонансное взаимодействие	51
2.3 Поляризационное взаимодействие	53
2.3.1 Индукционное взаимодействие	54
2.3.2 Дисперсионные взаимодействия	56
2.4 Обменное взаимодействие	62
2.5 Эффекты запаздывания в дальнедействующих взаимодействиях	70
2.6 Релятивистские (магнитные) взаимодействия	76
2.7 Взаимодействие между макроскопическими телами	83
Литература	89
Глава 3. Расчет межмолекулярных взаимодействий	94
3.1 Большие расстояния	94
3.1.1 Вывод общего выражения для мультипольного разложения опе- ратора кулоновского взаимодействия	94
3.1.2 Энергия взаимодействия двух атомов в S-состояниях	100
3.1.3 Дисперсионные и индукционные взаимодействия молекулярных систем	104
3.1.4 Сходимость мультипольного разложения	108
3.1.5 Устранение расходимости мультипольного разложения	116
3.2 Промежуточные и малые расстояния	122
3.2.1 Теория возмущений с учетом электронного обмена	122
3.2.2 Вариационные методы	134
Литература	151

Глава 4. Неаддитивность межмолекулярных взаимодействий	160
4.1 Физическая природа неаддитивности и определение многочастичных сил	160
4.2 Проявления неаддитивных эффектов	165
4.3 Теория возмущений и многочастичное разложение	170
4.3.1 Общие формулы	170
4.3.2 Доказательство аддитивности дисперсионной энергии во втором порядке ТВ	174
4.3.3 Дисперсионная энергия в высших порядках	175
4.4 Многочастичные эффекты в атомных кластерах	179
4.4.1 Кластеры инертных газов	179
4.4.2 Кластеры металлов	179
4.4.3 Природа связывания в кластерах щелочноземельных металлов	184
4.5 Схема атом-атомных потенциалов и неаддитивность	195
Литература	201
Глава 5. Модельные потенциалы	205
5.1 Полуэмпирические модельные потенциалы	205
5.1.1 Потенциал жестких сфер	205
5.1.2 Потенциал Леннард-Джонса	206
5.1.3 Модификации потенциала Леннард-Джонса	208
5.1.4 Потенциал Бакингема	210
5.1.5 Модификации потенциала Бакингема	211
5.1.6 Потенциалы, описывающие спектроскопические свойства двух-атомных молекул	213
5.1.7 Анизотропные потенциалы	220
5.1.8 Экранированный кулоновский потенциал	226
5.1.9 Потенциал Борна-Майера	228
5.1.10 Многопараметрический потенциал Бойса-Шавитта	229
5.1.11 Комбинированные (кусочногладкие) потенциалы	230
5.1.12 Модельные потенциалы при изучении металлов и полупроводников	232
5.1.13 Модельные потенциалы, параметризованные по результатам неэмпирических расчетов потенциальных поверхностей	239
5.2 Определение параметров модельных потенциалов	244
5.3 Реконструкция потенциалов на основе экспериментальных данных	249
5.3.1 Метод Ридберга-Клейна-Риса	250
5.3.2 Обратная задача рассеяния	252
5.3.3 Построение потенциалов из термофизических данных	259
5.4 Методы глобальной оптимизации	260
5.4.1 Постановка задачи	260
5.4.2 Симулированный отжиг	262
5.4.3 Методы деформации гиперповерхности	264
5.4.4 Генетический алгоритм	269
Литература	274
Приложение 1. Фундаментальные постоянные и таблица перевода единиц	282
Приложение 2. Необходимые математические сведения	284
П2.1 Векторное и тензорное исчисления	284
П2.1.1 Определение вектора; сложение векторов	284
П2.1.2 Скалярное и векторное произведения. Смешанное произведение	285

П2.1.3	Определители	289
П2.1.4	Векторный анализ. Градиент, дивергенция и ротор	290
П2.1.5	Векторные пространства и матрицы	293
П2.1.6	Тензоры	297
П2.2	Теория групп	300
П2.2.1	Свойства групповых операций	300
П2.2.2	Представления групп	306
П2.2.3	Группа перестановок	319
П2.2.4	Группы линейных преобразований. Группа трехмерных вращений	325
П2.2.5	Точечные группы	331
П2.2.6	Неприводимые тензорные операторы. Сферические тензоры ...	340
Литература	345

Приложение 3. Квантово-механические расчеты многоэлектронных систем	347
ПЗ.1 Адиабатическое приближение	347
ПЗ.2 Вариационные методы	351
ПЗ.2.1 Метод самосогласованного поля	351
ПЗ.2.2 Методы учета электронной корреляции	358
ПЗ.3 Теория возмущений	371
ПЗ.3.1 Теория возмущений Рэлея–Шрёдингера	372
ПЗ.3.2 Теория возмущений Мёллера–Плессе	374
ПЗ.3.3 Операторный формализм и теория возмущений Бриллюэна–Вигнера	377
ПЗ.3.4 Вариационная теория возмущений	380
ПЗ.3.5 Асимптотические разложения: аппроксиманты Паде	383
Литература	387