

<<分子振动光谱学基础>>

图书基本信息

书名：<<分子振动光谱学基础>>

13位ISBN编号：9787502507428

10位ISBN编号：7502507426

出版时间：1990.7

出版时间：化学工业出版社

作者：吴国祯

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>

## <<分子振动光谱学基础>>

### 内容概要

主题:分子光谱学-分子振动,振动光谱学.

## &lt;&lt;分子振动光谱学基础&gt;&gt;

## 作者简介

吴国祯

个人简历

清华大学物理系教授, 博士生导师,

台湾清华大学化学系学士. (1970)

美国Oklahoma大学化学博士 [ 1976 ]

美国City College, City Univ. of New York 博士后 (1980-1981)。

美国Colorado State University, 研究员 (1981-1982)。

1977年回国服务, 任职中国科学院化学所, 副研究员, 研究员, 博士生导师。

1995年转任清华大学物理系。

1989年11月—1990年7月, 香港浸会学院化学系, 访问教授. 讲授物理化学, 分子光谱学.

1998-1999 清华大学高等研究中心客座研究员

1999年1月—6月, 台湾中央大学物理系访问教授.

2005年5-6月, 香港浸会大学物理系非线性中心访问。

教学

原子分子物理 (本科生课程, 春季), 动力学的混沌理论 (研究生课程, 秋季)

研究领域

拉曼峰强研究包括

(1) 表面增强拉曼光谱学 (1985 - 1987, 2002-2004国家基金委资助),

[ 2 ] 极稀微掺杂分子晶体相变拉曼峰强的研究 [ 1997 - 1999国家基金委资助 ]

目前, 正在进行的项目 ' 拉曼激发弛豫过程中, 分子中电荷分布随时间变化的行为 ' ( 国家基金委资助2008--2010 ), 以及 分子高激发振动态的混沌性质

拉曼方法是研究分子结构的有效手段。

拉曼谱峰的频率反映分子中化学键的强度, 而拉曼峰强则隐含着分子中电子与核的运动相互作用的诸多信息. 目前拉曼谱学界仍鲜有重视从拉曼峰强入手来研究分子结构信息的。

表面增强拉曼谱是分子吸附在金, 银和一些过渡金属粗糙表面(包括电极, 胶体表面, 它们的本质是纳米颗粒) 后拉曼峰强极度增强的现象, 因此它是良好的从拉曼峰强角度研究的对象。

我们创立了一个从拉曼峰强求取分子的键极化率的方法(The molecular polarizabilities and their implications as interpreted from the surface enhanced Raman intensities:a case study of piperidine\\\'

J.Chem.Phys. 87 7300(1987)), 从而得到一系列分子中有关电子行为的丰富信息。

这是一个新颖的, 有效的手段, 可为人们提供诸多用别的方法难以获得的细致的分子内电子行为, 从而丰富了人们对有关表面增强拉曼机制, 金属表面, 以及吸附分子的性质的理解。

此项工作获1994年中国科学院自然科学二等奖。

另外一个体系是相变中拉曼峰强的显著变化, 我们也从拉曼峰强研究中获得许多掺杂晶体相变的重要信息。

晶格振动模的研究表明: 在相变过程中, 极其稀微的掺杂对分子晶体振动模的峰强会有极其敏感的影响。

这反映在峰强与温度呈指数关系 $|T - T_c|$  的指数 上。

对于不同的振动模, 对于不同的掺杂离子和掺杂浓度会有不同的 。

突出的是, 如硝酸铵晶体的硝酸根离子的全对称振动模的 值与其它振动模的 值有着显著的不同行

## &lt;&lt;分子振动光谱学基础&gt;&gt;

为。  
前者随掺杂离子浓度的增加而变大；后者却呈减小。  
当二者相同时的掺杂浓度是一个特征量。  
此特征浓度所对应的掺杂离子的平均距离与掺杂离子的质量的根号成正比。  
这个观察的物理背景是源于掺杂离子的共振模。  
易言之，掺杂离子的平均距离与掺杂离子的共振模的延伸范围有关，并且成比例。  
因此，这是研究极其稀微掺杂的有效手段。  
研究的体系有如： $\text{Na}_x\text{K}_{1-x}\text{HF}_2$ ,  $\text{KH}_{1-x}\text{D}_x\text{F}_2$ ,  $\text{NH}_4-x\text{D}_x\text{NO}_3$ ,  $\text{K}_x/\text{Na}_x(\text{NH}_4)_{1-x}\text{NO}_3$ ,  $\text{F}_x/\text{Cl}_x/\text{Br}_x(\text{NH}_4)_{1-x}\text{NO}_3$   
〔3〕分子高激发振动态〔1995 - 1997, 2000 - 2002, 2004-2006国家自然科学基金委资助〕。

本研究项目运用李代数方法来研究分子高激发振动态的结构。  
总体思路主要在避开解薛丁谔方程的复杂问题，同时结合实验的结果，半经典地处理复杂的高激发振动态，突出其物理图象以及对称性及其破缺等现象。

研究的思路在于探索复杂高激发振动态的奇异结构包括分形与混沌。  
高激发振动态的物理行为与可以用简正模来描述的低振动态会有显著的不同。  
后者的运动主要是简谐的，而前者会有强烈的非线性效应。  
非线性效应将使得高激发振动态有着许多低振动态所没有的奇异性质，包括其运动的形式、能量的转移等。  
这些高激发振动态的性质目前均未为人们所认识了解。  
这就是本研究工作的主要目标与内容。  
于此特别需要注意的是非线性效应将使得高激发振动态不再是简单的周期运动，而将显示其独特的不规则性乃至混沌,这正是本研究所要解决的关键问题。

本课题研究的内容主要包括有分子高激发振动态的半经典轨迹性质、能量在不同自由度之间的转移、简正模与局域模的性质及其区分以及可能的混沌现象。  
同时，本项目特别着重从拓扑角度来探讨动力学在相空间中的整体性质。  
此外，本项目对由高激发弯曲振动所导致的1,2位移现象，以及高激发振动态的归属，混沌体系的量子化等重要课题进行了深入的研究，这些工作包括利用李雅普诺夫指数对混沌运动的分析，近似守恒量子数的存在和其物理意义，高激发振动态接近解离时，势能曲线的求取，混沌轨迹和周期轨迹的性质及它们与不可积体系的量子化的关系，运用H函数来研究振动能量的弛豫等。

在分子振动的陪集空间表示中，轨迹体现着振动的非线性，混沌动力学行为。  
本项目主要从轨迹的性质如其周期性，李雅普诺夫指数了解高激发态的动力学性质，运动的模式（如是否具有遍历性，局域性），是否具有（近似的）守恒量，以及这些守恒量，或它们的破缺，与本征系数（波函数），相空间中的密度，轨迹的混沌程度的关系。  
总之，本项目着重研究了在分子高激发振动体系中量子力学中的各种概念（如量子数，量子态），在经典近似下与非线性力学中的各种概念的内在关联。  
同时，我们将特别着重探讨周期、混沌轨迹的性质以及它们与不可积体系的量子化问题的关联特性等。

这个方法开拓了分子振动光谱学与非线性力学的连通渠道。  
非线性力学领域中的丰富成果大大丰富了我们对于分子振动和分子光谱学的理解。  
这些理解固然多为经典的，但却是量子观点的重要补充，也丰富了对量子观点的理解。

循此思想，在过去的几年中，我们得到国家自然科学基金委的资助，在此领域做了不少工作取得了成

<<分子振动光谱学基础>>

果。

( 详见相关工作论文和专著《分子振动的混沌理论》 )

奖励、荣誉和学术兼职

获1994年中国科学院自然科学二等奖 ( 表面增强拉曼光谱学研究工作 )

中国物理学会光散射专业委员会委员, (1987-2001任副主任), 光散射学报编委 (1995-2001 任主编)。

《中国物理快报》特邀评委, 《化学物理》编委

清华大学物理系学术委员会主任 ( 1998-2000 ) , 学位委员会委员 ( 2004- ) , 校学术委员会委员 ( 1998-2003 )

主要论著

至2007年, 共发表论文109篇, 其中66篇发表在国际期刊上。

专著: 1.吴国祯, 化工出版社, 1990年。

2.吴国祯, 2001年, 台湾高立出版社. 北京华夏英才基金资助由清华大学出版社出版(2001年)。

3. ,科学出版社出版 ( 2003 ) 。

4.< Nonlinearity and chaos in Molecular vibrations>, Elsevier, 2005.

5.

<<分子振动光谱学基础>>

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>