

<<高能体系中的分子间相互作用>>

图书基本信息

书名 : <<高能体系中的分子间相互作用>>

13位ISBN编号 : 9787030121790

10位ISBN编号 : 7030121791

出版时间 : 2004-1

出版时间 : 科学出版社

作者 : 肖鹤鸣

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>

<<高能体系中的分子间相互作用>>

内容概要

本书是作者近六年来部分研究工作的总结，概述高能多聚体、混合体和晶体中的分子间相互作用和结构-性能关系。

全书共分八章：第一章简述超分子化学和分子间相互作用的概念、本质、研究方法和目的；第二至六章依次讨论四大类(硝基、硝胺、硝酸酯和叠氮类)体系以及其他高能体系中的分子间相互作用，多为气相下高精度计算结果，含结构、IR谱和热力学性质的讨论，并发现最稳定二聚体与分子型晶体的结构相似性；第七章描述典型高能晶体及其吸附体系中的分子间相互作用，与实验晶格能、吸附热等相一致；第八章预估典型高能化合物与系列高聚物之间的近似相互作用，为高聚物黏结炸药(PBX)或其他复合高能材料的配方设计开辟新的途径。

本书可供四大基础化学、高分子物理与化学、炸药化学、理论和计算化学专业以及材料学专业的高校师生和科技工作者参考阅读。

<<高能体系中的分子间相互作用>>

书籍目录

前言第一章 超分子化学和分子间相互作用 1.1 超分子化学 1.2 分子间相互作用的本质和作用能分割
1.3 分子间相互作用的研究方法 1.4 高能超分子体系的结构和性能 参考文献第二章 硝基类高能体系中的分子间相互作用 2.1 (CH_3NO_2)₂体系的分子间相互作用 2.2 ($\text{NH}_3+\text{CH}_3\text{NO}_2$)混合体系的分子间相互作用 2.3 (TNB+TATB)混合体系的分子间相互作用 2.4 (TATB+RDX)及(TATB+HMX)体系的分子间相互作用 2.5 (TNT)₂、(TNT十RDX)体系的分子间相互作用 2.6 TATB与小分子和相关高分子链模型物的相互作用 2.7 Fox-7二聚体的分子间相互作用 2.8 NTO二聚体的分子间相互作用 参考文献第三章 硝胺高能体系中的分子间相互作用 3.1 (H_2NNO_2)₂体系的分子间相互作用 3.2 (CH_3NHNO_2)₂体系的分子间相互作用 3.3 二甲硝胺多聚体的分子间相互作用 3.4 (RDX)₂的分子间相互作用 3.5 RDX和HMX与若干小分子的相互作用 参考文献第四章 硝酸酯高能体系中的分子间相互作用 4.1 (CH_3ONO_2)₂体系的分子间相互作用 4.2 ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}_2$)₂体系的分子间相互作用 4.3 硝化甘油二聚体的分子间相互作用 4.4 (硝化甘油十硝化乙二醇)混合体的分子间相互作用 4.5 太安与小分子、太安与高分子链的分子间相互作用 参考文献第五章 叠氮化物分子间的相互作用 5.1 叠氮化氢多聚体的分子间相互作用——协同效应 5.2 叠氮甲烷二聚体的分子间相互作用 5.3 叠氮乙烷二聚体的分子间相互作用 5.4 叠氮乙烯二聚体的分子间相互作用 参考文献第六章 其他高能体系中的分子间相互作用 6.1 (NH_2NH_2)₂体系的分子间相互作用 6.2 ($\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$)₂体系的分子间相互作用 6.3 (NHF_2)_n(n=2-4)体系的分子间相互作用 6.4 (HNO_3)₂体系的分子间相互作用 6.5 $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{H}_2\text{O})_n$ (n=1-3)混合体系的分子间相互作用 参考文献第七章 高能晶体及其吸附体系中的分子间相互作用 7.1 -HMX晶体中的分子间相互作用 7.2 TATB晶体及其吸附水体系的分子间相互作用 7.3 Fox-7晶体的分子间相互作用 7.4 八硝基立方烷晶体中的分子间相互作用 7.5 季戊四醇四硝酸酯晶体中的分子间相互作用 参考文献第八章 PBX配方设计的分子水平研究 8.1 计算方法、模型和细节 8.2 TATB与高聚物的(MM)分子间相互作用 8.3 TATB与高聚物的(MO)分子间相互作用 8.4 HMX与高聚物的(MM)分子间相互作用 8.5 HMX与高聚物的(MO)分子间相互作用 8.6 PETN与高聚物的(MM)分子间相互作用 8.7 PETN与高聚物的(MO)分子间相互作用 8.8 PBX配方设计新途径 参考文献后记

<<高能体系中的分子间相互作用>>

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>