

<<高能量密度材料的理论设计>>

图书基本信息

书名：<<高能量密度材料的理论设计>>

13位ISBN编号：9787030203908

10位ISBN编号：7030203909

出版时间：2008-3

出版时间：科学出版社

作者：肖鹤鸣 等著

页数：334

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>

<<高能量密度材料的理论设计>>

内容概要

本书是作者近十年高能量密度材料部分科研工作的总结。

全书共三篇20章。

第一篇第1章简介一般理论计算方法，主要有量子化学、分子力学、分子动力学和静态力学分析等方法；第2章重点介绍高能量密度化合物(HEDC)能量和稳定性的定量判别标准及其计算方法。

后两篇共18章，以被誉为“新世纪能源材料”的有机笼状和氮杂环硝胺两类多系列高能物质为研究对象，主要包括多取代基金刚烷和多取代基六氮杂金刚烷(第二篇)以及单环硝胺、双环硝胺、三环硝胺、螺环硝胺和咪唑稠环硝胺(第三篇)等体系，按能量和稳定性标准细致判别和筛选HEDC目标物，包括它们的气相分子、固态晶体直至复合材料，详细阐述一般条件下的结构-性能关系以及温度、压力、浓度等条件的变化对其的影响，总结了HEDC分子设计至高能量密度材料(HEDM)配方设计的成果和规律。

本书可供基础化学、高分子物理与化学、炸药化学、爆炸化学、理论和计算化学以及材料学、材料物理与化学等专业的高校师生和科技工作者参考阅读。

<<高能密度材料的理论设计>>

作者简介

肖鹤鸣，南京理工大学教授，博士生导师，分子与材料计算研究所所长。

1940年7月出生于江苏省泰兴市。

1963年毕业于南京大学化学系。

1978~1980年吉林大学量子化学进修班结业。

1990年以来，先后出访前苏联(俄罗斯、乌克兰)、美国、荷兰、法国、新加坡和捷克等国，作学术报告、参加国际会议、进行合作研究和联合培养博士生。

从事教学和科研工作40多年。

主讲过无机化学、物理化学、普通化学、化学热力学、硝化理论基础、结构化学、量子化学、群论和化学、分子轨道计算等本科和研究生课程，指导了硕士生、博士生、博士后和国内外访问学者数十人。

出版译作和统编教材各一部。

开辟我国(高)含能材料结构、性能理论研究新的方向和领域。

主持国家自然科学基金和“973”子专题等科研项目共约30项，获省部级科研成果奖5项，在国内外学术期刊上发表论文360多篇，出版学术专著6部。

在撞击感度理论判别、生成热精确计算、热解和水解机理揭示、芳烃硝化和Mannich反应机理阐明、基于量子化学计算密度爆速和爆压、开辟高能体系分子间相互作用及其精确分割研究，对HEDC / HEDM进行分子设计、晶体计算和分子模拟等方面，取得原创性丰硕成果，被较多引用和应用，在国内和国际上产生了广泛的影响。

被评为首批“江苏省优秀研究生教师”(1989)、国务院“政府特殊津贴”专家(1993)、“全国优秀博士学位论文指导教师”(2001)和“江苏省优秀博士生导师”(2002)。

<<高能密度材料的理论设计>>

书籍目录

引言第一篇 理论计算方法 第1章 一般理论计算方法简介 1.1 量子化学方法 1.2 “量化后”计算
 1.3 力场方法 1.4 静态力学分析方法 参考文献 第2章 HEDC的定量判别方法 2.1 晶体密度预测 2.2
 爆速爆压预测 2.3 稳定性和感度预测 参考文献第二篇 有机笼状类HEDM 第3章 金刚烷的硝基衍生
 生物 3.1 IR谱 3.2 热力学性质 3.3 能量特性 3.4 热解机理和稳定性 3.5 感度理论判据 参考文献
 第4章 金刚烷的NO₂气相硝化反应机理 4.1 反应机理 4.2 分子几何 4.3 原子电荷 4.4 IR谱 参考文
 献 第5章 金刚烷的硝酸酯基生物 5.1 生成热 5.2 能量特性 5.3 热解机理和热稳定性 参考文
 献 第6章 六氮杂金刚烷的硝基生物 6.1 IR谱 6.2 热力学性质 6.3 能量性质 6.4 热解机理和稳定性
 参考文献 第7章 六氮杂金刚烷的氰基、异氰基和硝酸酯基生物 7.1 生成热 7.2 能量性质 7.3 热
 稳定性 参考文献 第8章 CL-20 4种晶型和不同压力下 -CL-20的能带结构 8.1 计算方法及其验证
 8.2 CL-20 4种晶体的能带结构和感度判别 8.3 压力对 -CL-20晶体结构和性能的影响 参考文
 献 第9章 潜在HEDC晶体结构和性能的预测 9.1 晶体结构预测的原理和方法 9.2 晶型预测结果 9.3 晶体
 能带和电子结构 9.4 带隙和感度 参考文献 第10章 -CL-20/氟聚物PBX的MD模拟 10.1 力场、模
 型和模拟细节 10.2 力学性能 10.3 结合能 10.4 爆炸性能 参考文献 第11章 温度、高聚物含量和晶
 体缺陷对PBX性能的影响 11.1 模拟方法、模型和细节 11.2 温度的影响 11.3 高聚物含量的影响
 11.4 晶体缺陷的影响 参考文献 第12章 -CL-20基PBX配方设计初探 12.1 模型和模拟细节 12.2 相
 容性 12.3 安全性 12.4 力学性能 12.5 能量性质 参考文献第三篇 氮杂环硝胺类HEDM 第13章 单
 环硝胺 13.1 电子结构 13.2 IR谱 13.3 热力学性质 13.4 爆炸性能 13.5 热解机理 参考文献 第14
 章 双环-HMX及其同系物 14.1 电子结构 14.2 IR谱 14.3 热力学性质 14.4 爆炸性能 14.5 热解机理
 参考文献 第15章 TNAD及其同分异构体 15.1 电子结构 15.2 IR谱 15.3 热力学性质 15.4 爆炸性
 能 15.5 热解机理 参考文献 第16章 三环硝胺衍生物 16.1 热力学性质 16.2 爆炸性能 16.3 热力学
 稳定性 参考文献 第17章 螺环硝胺 17.1 分子几何 17.2 电子结构 17.3 IR谱 17.4 热力学性质 17.5
 爆炸性能 17.6 热解机理 参考文献 第18章 咪唑稠环硝胺 18.1 分子几何 18.2 电子结构 18.3 IR谱
 18.4 热力学性质 18.5 爆炸性能 参考文献 第19章 双环-HMX和TNAD晶体结构和性能的DFT计算
 19.1 计算方法及其比较 19.2 常压下的结果 19.3 不同压力下的结果 参考文献 第20章 双环-HMX
 和TNAD晶体及其为基PBX的MD模拟. 20.1 力场、模型和模拟细节 20.2 晶体的热膨胀性能 20.3 晶
 体的弹性力学性能 20.4 PBX的弹性力学性能 20.5 PBX的结合能和爆炸性能 参考文献 附录 .预
 测晶体密度中所选45种硝胺化合物的分子结构 .8种笼状HEDC晶体结构的Dreiding力场预测 .8种
 笼状HEDC的3种优化分子结构 .氮杂环硝胺键离解能计算中涉及的总能量和零点能 结语

<<高能密度材料的理论设计>>

章节摘录

第1章 一般理论计算方法简介对高能化合物分子、晶体以及复合材料的广泛理论研究需要运用较多的理论和方法。

本篇包括两章。

第1章简介本书所用到的一般理论和计算化学方法。

主要包括量子化学和“量化后”计算方法以及力场方法，力场方法主要指分子力学和分子动力学方法。

此外，还介绍了静态力学分析方法。

第2章阐述高能密度化合物(HEDC)的能量和稳定性的定量判别方法，主要包括密度、爆速和爆压的理论预测方法以及热解引发机理、稳定性和感度的理论预测方法。

1.1 量子化学方法1900年Planck提出量子论。

1926年Schrödinger方程问世，标志着量子力学的建立。

1927年Heitler和London用量子力学基本原理研究氢分子结构，标志着量子化学新学科的诞生。

随着量子化学理论方法的发展和计算机技术的进步，80多年来，量子化学已渗透应用到各学科各领域，在研究原子、分子和晶体结构以及揭示物质结构与性质的关系方面，取得了举世瞩目的成就。

关于各种量子化学计算方法的原理和应用，可参见许多教科书和相关著作。

囿于作者见闻，文献中仅列出一些供参考[1~22]。

限于篇幅，以下仅作简介。

<<高能密度材料的理论设计>>

编辑推荐

《高能密度材料的理论设计》可代基础化学、高分子物理与化学、炸药化学、爆炸化学、理论和计算化学以及材料学、材料物理与化学等专业的高校师生和科技工作者参考阅读。

<<高能量密度材料的理论设计>>

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>