

<<纳米笼化学>>

图书基本信息

书名：<<纳米笼化学>>

13位ISBN编号：9787122019929

10位ISBN编号：7122019926

出版时间：2008-3

出版时间：化学工业出版社

作者：张彩云

页数：294

字数：230000

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>

<<纳米笼化学>>

内容概要

本书在量子化学研究的基础上，用密度泛函方法（Density Functional Methods）对纳米笼的结构进行了设计和优化计算，同时对体系的稳定构型进行了全方位的分析研究。

全书内容可分为三部分，第一部分介绍纳米笼簇合物的研究进展；第二部分介绍理论研究的基础及方法；第三部分主要是对碳、硅及三、五族纳米笼的结构和稳定性的研究，并对纳米笼的修饰及所产生的特性进行了详细的阐述。

本书对纳米材料的研究、合成和新产品的开发和利用具有一定的指导作用，亦可作为高等院校化学专业的师生进行教学、研究的教材和学习的参考资料。

<<纳米笼化学>>

书籍目录

绪论 0.1 纳米笼簇合物结构的研究进展 0.2 理论研究基础 0.2.1 薛定谔方程与三个基本近似
0.2.2 密度泛函理论简介 0.2.3 其他相关理论基础 0.2.4 光电子能谱 参考文献第1章 Gaussian
程序的功能及理论计算 1.1 功能 1.1.1 基本算法 1.1.2 基本功能 1.2 计算模型 1.2.1 理论模型
1.2.2 模型化学 1.2.3 使用方法 1.3 理论计算 1.3.1 预测分子特性 1.3.2 计算内容 参考文献
第2章 富勒烯C60结构 2.1 C60的结构 2.2 C60的合成方法 2.3 C60的性质 2.3.1 物理性质 2.3.2
化学性质 2.4 富勒烯-C60的应用前景 参考文献第3章 碳富勒笼结构 3.1 碳富勒笼的合成 3.2
碳富勒笼的理论研究 3.3 碳富勒笼C_n (n=30~70) 结构的稳定性规则 参考文献第4章 金属富勒烯结
构 4.1 金属富勒烯的合成方法 4.1.1 同步合成法 4.1.2 两步合成法 4.1.3 核反应法 4.2 金
属富勒烯的分离提纯 4.2.1 金属包合物的萃取与富集 4.2.2 金属富勒烯的高效液相色谱分离 4.3
内含式金属富勒烯的结构和性质 4.3.1 内含式金属富勒烯的结构 4.3.2 内含式金属富勒烯的电学
性质 4.3.3 内含式金属富勒烯的反应性能 4.4 外接式金属富勒烯结构 4.4.1 外接 B族金属富
勒烯 4.4.2 外接 族金属富勒烯 4.5 金属富勒烯的应用前景 参考文献第5章 十二面体碳笼簇
合物第6章 硅笼簇合物第7章 硼氮笼簇合物第8章 铝氮笼簇合物附录

<<纳米笼化学>>

章节摘录

第1章 Gaussian程序的功能及理论计算： 1.2 计算模型： 1.2.1 理论模型： 化学的计算方法主要有分子力学理论（molecular mechanics）和电子结构理论（electronic structure theory）。两者的共同点如下。

分子的能量 分子的性质可以根据能量按照一定的方法得到。

几何优化 在起始结构的附近寻找具有最低的能量结构。

几何优化是根据能量的一阶导数进行的。

计算分子内运动的频率计算依据是能量的二阶导数。

(1) 分子力学理论： 分子力学理论采用经典物理对分子进行处理，可以在MM3，HyperChem，Quanta，Sybyl，Alchemy等软件中看到。

根据所采用的力场的不同，分子力学理论又分为很多种。

分子力学理论方法很便宜（做量化的经常用贵和便宜来描述计算，实际上就是计算时间的长短，因为对于要花钱上机的而言，时间就是金钱；对于自己有机器的，要想算得快，也要多在机器上花钱），可以计算多达几千个原子的体系。

其缺点是每一系列参数都是针对特定原子得出的。

没有对于原子各个状态的统一参数。

计算中忽略了电子，只考虑键和原子，自然就不能处理有很强电子效应的体系，比如不能描述键的断裂。

(2) 电子结构理论： 这一理论基于薛定谔方程，采用量子化学方法对分子进行处理。主要有两类。

半经验方法 包括AMI，MINDO/3，PM3，常见的软件包有MOPAC，AMPAC，HyperChem以及Gaussian。

半经验方法采用了一些实验得来的参数，来帮助对薛定谔方程的求解。

从头计算法从头算，在解薛定谔方程的过程中，只采用了几个物理常数，包括光速、电子和核的质量、普朗克常数，在求解薛定谔方程的过程中采用一系列的数学近似，不同的近似也就导致了不同的方法。

最经典的是Hartree—Fock方法，缩写为HF。

从头算能够在很广泛的领域提供比较精确的信息，当然计算量要比前面讲的方法大得多，就是贵得多了。

(3) 密度泛函理论： 密度泛函是最近几年兴起的第三类电子结构理论方法。

它采用泛函（以函数为变量的函数）对薛定谔方程进行求解，由于密度泛函包含了电子相关，它的计算结果要比HF方法好，计算速度也快。

<<纳米笼化学>>

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>