

<<四唑化学的现代理论>>

图书基本信息

书名：<<四唑化学的现代理论>>

13位ISBN编号：9787030088864

10位ISBN编号：7030088867

出版时间：2000-10-01

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>

## <<四唑化学的现代理论>>

### 内容概要

这是化学和材料学领域颇具特色的一部学术专著。

全书共十章，除第一章简介量子化学中从头计算、密度泛函理论和基于统计力学求热力学、动力学参量等当代理论化学的主要研究方法外，其余各章均为作者最新研究工作的总结。

二至六章提供迄今为止最为系统完整的四唑衍生物的气相和液相分子几何和电子结构，以及红外光谱和300~1000K的熵、焓、热容等热力学性质，关联芳香性、稳定性和溶剂效应，尤其报道了精确生成热。

七和八章分

## <<四唑化学的现代理论>>

### 书籍目录

结论

参考文献

第一章现代理论化学研究方法

1.1 从头计算 (ab initio) 方法

1.2 密度泛函理论 (DFT) 方法

1.3 “量化后” (PQ) 研究 热力学函数和动力学参数的计算

参考文献

第二章四唑衍生物的气相几何构型

2.1 甲基四唑衍生物的气相几何

2.2 氨基四唑衍生物的气相几何

2.3 羟基四唑衍生物的气相几何

2.4 胍基四唑衍生物的气相几何

2.5 氰基四唑衍生物的气

<<四唑化学的现代理论>>

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>