

<<有机化学中的拓扑量子方法>>

图书基本信息

书名：<<有机化学中的拓扑量子方法>>

13位ISBN编号：9787030277756

10位ISBN编号：7030277759

出版时间：2010-6

出版时间：科学出版社

作者：曹晨忠

页数：182

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>

## &lt;&lt;有机化学中的拓扑量子方法&gt;&gt;

## 前言

化合物的分子结构与性能/活性的定量关系，是有机化学中最基本的理论问题。

该理论问题一直备受关注，并被广泛深入研究。

在长期的研究实践中已逐步形成了量子化学、拓扑化学两大理论方法以及分子力学和取代基效应等经验方法。

量子化学建立在物理学的量子力学基础上，通过求解分子波函数，获得分子结构特征的有关信息，所得参数有严格明确的物理意义。

原则上量子化学方法可以精确地表达分子的全部电子、几何信息和它们之间的相互作用，在处理分子立体结构和电子结构上具有独特的优势。

拓扑化学建立在数学的图论基础上，而图论的基础和实质是路径与连接问题。

将图论引入化学，为建立分子结构数学模型提供了理论工具。

化学体系的通常特点就是“场所”的存在以及这些“场所”之间的连接。

“场所”可以是原子、电子、分子、分子碎片、中间体等，而这些“场所”之间的连接可以代表化学键、反应步骤、范德华力等。

为简便起见，用顶点表示“场所”，用边代表连接，这样化学体系就可以转换成化学图的形式。

利用分子图就可以提取分子的拓扑指数。

拓扑化学方法具有计算简便、取值客观等优点，在化合物的定量结构性能/活性相关研究中有其独到的方便之处，因而越来越受到化学工作者的重视。

应该注意到，由于数学理论的要求和计算技术方面的困难，量子化学参数的应用并不如传统的分子结构参数那样应用广泛。

虽然量子化学参数没有实验测量性能参数存在的系统误差，但是在计算过程中为了简化计算采取了多步近似，从而导致固有误差产生，并且还存在着计算时间长、过分依赖基组等缺点。

另外，量子化学参数不能解释分子的形状、大小、分支等体积效应，计算分子的局部信息也不方便，尤其在计算沸点、热容、导热率等宏观性质方面无能为力。

另外，拓扑化学的拓扑指数方法虽然计算简单快捷，但它难以表达分子的三维信息，对表达分子中的电子排布、轨道能级等内部信息无能为力，而且所得的指数物理意义不清楚，模型方程难以解释。

鉴于上述两种方法各自存在优缺点，有研究者试图将两者结合起来，提出了量子拓扑化学方法。

先对有机分子进行量子化学计算，得到分子中各原子的电子分布，然后将原子电荷代入分子图的连接矩阵、距离矩阵或关联矩阵等，进一步进行数学处理得出有机分子的量子拓扑指数，用于有机化合物的定量结构性能/活性相关研究。

该方法得到的量子拓扑指数确实比拓扑指数表达的分子结构信息更加丰富，对分子图顶点信息的区分也更有效，得到的定量结构性能/活性相关结果更好。

然而，量子拓扑化学方法的应用，必须具备比较深厚的数学物理基础，同时会遇到同量子化学方法一样的困难，给使用带来不便而难以推广应用。

既发挥量子化学和拓扑化学两者的优点，又避免复杂的数学物理计算、提取更有效的分子结构参数，这将是很有意义的工作。

我们研究组在这方面进行了有益的探索，提出了拓扑量子化学方法。

## <<有机化学中的拓扑量子方法>>

### 内容概要

本书系统介绍了有机化学中的拓扑量子方法及其在有机化学定量结构—性能 / 活性相关(QSPR / QSAR)中的应用。

主要内容包括基团极化效应参数和拓扑立体效应指数的计算：有机分子拓扑量子键连接矩阵的构造以及分子结构特征参数的提取，矩阵特征根、拓扑量子轨道能级、原子电荷、化学键的键级等参数的计算；应用上述分子结构参数，对烷烃、单取代烷烃、链状烯烃、含C=O键和N=O键有机化合物、芳香烃和极性芳香化合物等各类有机物的热力学性能、化学反应性能、光学性能、色谱性能、价电子能量、酸性和生物活性进行定量相关研究。

本书可以作为化学专业、生物化学专业和物理化学专业的大学高年级学生、研究生、教师等的教学用书或参考书，也可供化学化工、生物化学、环境化学、医药、农药和材料分子设计等领域研究人员参考。

## &lt;&lt;有机化学中的拓扑量子方法&gt;&gt;

## 书籍目录

前言第1章 绪论 1.1 有机分子结构的表示 1.2 量子拓扑化学与拓扑量子化学 参考文献第2章 拓扑量子方法的有关概念和参数 2.1 拓扑量子键连接矩阵 2.2 基团极化效应参数 2.3 拓扑立体效应指数 2.4 拓扑量子轨道能级与原子电荷 参考文献第3章 烷烃的性能估算 3.1 键连接矩阵特征根与键离解能 3.2 烷烃的原子化热与生成焓 3.3 烷烃的导热率与电离能 3.4 碳的核磁共振化学位移 3.5 烷烃密度与折射率 本章小结 参考文献第4章 取代烷烃的性能估算 4.1 RX的生成焓 4.2 RX的色谱保留值 4.3 RX的密度与折射率 4.4 RX的沸点 本章小结 参考文献第5章 链状烯烃性能估算 5.1 烯烃 $\pi$ 体系拓扑量子键连接矩阵 5.2 烯烃的 $\pi$ 电子电离能 5.3 烯烃紫外光谱吸收能量的估算 5.4 单烯烃C=C键碳的 $\pi$ 电荷密度 5.5 单烯烃的生成焓 参考文献第6章 含C=O和N=O化合物有关性能的估算 6.1 脂肪醛酮紫外光谱吸收能量 6.2 RX=O伸缩振动频率 6.3 醛酮C=O亲核加成速率 本章小结 参考文献第7章 芳香烃性能估算 7.1 烷基苯的 $\pi$ 分子轨道相对能量及 $\pi$ 电荷 7.2 烷基苯的生成焓等物理性质的估算 7.3 烷基苯的气相色谱保留值 7.4 烷基苯的生物活性 本章小结 参考文献第8章 极性芳香化合物性能估算 8.1 卤代苯酚pKa的估算 8.2 卤代苯酚羟基O—H键能和毒性 8.3 烷基取代苯酚对环氧合酶COX抑制活性 8.4 极性基团取代苯物理化学性能的估算 8.5 硝基芳烃衍生物QSAR研究 8.6 吡啶及其衍生物QSPR / QSAR研究 本章小结 参考文献

<<有机化学中的拓扑量子方法>>

章节摘录

插图：

## <<有机化学中的拓扑量子方法>>

### 编辑推荐

《有机化学中的拓扑量子方法》是由科学出版社出版的。

<<有机化学中的拓扑量子方法>>

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>