

<<高能化合物的结构和性质>>

图书基本信息

书名：<<高能化合物的结构和性质>>

13位ISBN编号：9787118036572

10位ISBN编号：7118036579

出版时间：2004-12-1

出版时间：国防工业出版社

作者：肖鹤鸣

页数：375

字数：475000

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>

<<高能化合物的结构和性质>>

内容概要

本书是作者近二十年部分科研工作的总结。

概述用物理化学（主要是量子化学）方法，研究高能化合物的晶体、分子和电子结构及其与物理、化学和爆炸、爆轰性质之间的关联。

全书共八章，涉及多系列各类型硝基、硝胺、硝酸酯和叠氮类化合物，除在新的较高理论水平上继续关注传统的典型爆炸物（如TATB、HMX、PETN和 $Pb(N_3)_2$ 等）而外，本书的重点放在被称为“新世纪能源材料”的笼状高密度材料（HEDM）和钝感高能炸药（IHE）上，如CL-20、多取代基立方烷和多硝基金刚烷以及Fox-7和ANTA等。

详细描述它们的结构、IR谱、热力学性质、热解和水解机理。

还报导芳烃亲电取代硝化机理研究新结果，总结撞击感度的理论判据，给出基于量子化学估算爆速、爆压的新方法。

本书的目的是为新型品优高能化合物的分子设计和合成，以及老炸药的改性、安全生产和使用，奠定微观理论基础，提供信息、规律和指导。

本书适用于化学和炸药化学、材料学和含能材料等专业的高校老师、研究生和高年级大学生作教学参考书，对相关专业的科研人员也有参考价值。

<<高能化合物的结构和性质>>

书籍目录

第1章 晶体结构和性质 1.1 γ -HMX的晶体结构和性质 1.2 TATB的结构和性质 1.3 Fox-7的周期性DET研究 1.4 ONC的周期性DFT研究 1.5 PETN的晶体能带结构和起爆机理 1.6 碱金属叠氮盐的晶体结构和性质 1.7 γ -Pb(N₂)₂晶体的周期性从头计算 1.8 NTO镉(II)配合物的实验和理论 1.9 BTF晶体结构和密度的预测 参考文献第2章 分子和电子结构 2.1 ANTA的结构和互变异构动力学 2.2 Fox-7同分异构体的结构和稳定性 2.3 CL-20的第一性原理研究 2.4 多硝基立方烷的分子几何构型和电子结构 2.5 环杂硝胺分子结构和电子结构比较 2.6 HHTDD的分子和电子结构 2.7 硝酸酯类化合物的分子和电子结构 2.8 溶剂和取代基对硝酸甲酯结构的影响 2.9 有机叠氮化物的分子几何构型 2.10 叠氮二氢铝多聚体的结构和结合能 2.11 BTF的分子几何构型和电子结构 2.12 FNO₂和N₃⁺的激发态高水平精确计算 参考文献第3章 生成热及其递变规律 3.1 多氟基立方烷的精确生成热计算 3.2 多异氟基立方烷极高的生成热 3.3 多硝基立方烷的生成热及其特殊递变规律 3.4 多硝酸酯基立方烷的生成热 3.5 多硝基金刚烷的生成热和桥头碳效应 3.6 烷基硝酸酯生成热的多种方法研究 3.7 高能化合物近似生成热计算 参考文献第4章 红外光谱和热力学性质 4.1 多硝基立方烷的IR谱和热力学性质 4.2 CL-20的IR谱和热力学性质 4.3 多硝基金刚烷的IR谱和热力学性质 4.4 Fox-7同分异构体的IR谱和热力学函数 4.5 ANTA的热力学性质和互变异构热力学 4.6 环杂硝胺的IR谱和热力学性质 4.7 烷基硝酸酯的IR谱和热力学性质 4.8 溶剂和取代基对硝酸甲酯IR谱的影响 4.9 叠氮二氢铝多聚体的IR谱和热力学性质第5章 硝化反应机理第6章 水解反应机理第7章 热角反应机理第8章 撞击感度、爆速和爆压后记

<<高能化合物的结构和性质>>

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>