

<<现代科学中的化学键能及其广泛应用>>

图书基本信息

书名：<<现代科学中的化学键能及其广泛应用>>

13位ISBN编号：9787312022265

10位ISBN编号：731202226X

出版时间：2008-10

出版时间：中国科学技术大学出版社

作者：罗渝然 等著

页数：282

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>

## <<现代科学中的化学键能及其广泛应>>

### 前言

我们的母校——中国科学技术大学——被誉为“科学家的摇篮”。

我们四人都从不同地方到科大学习、任教、讲学或工作过。

为了感谢母校的培养以及老师、同学、校友和朋友们的帮助，我们愿为科大“校友文库”贡献这份新著。

化学键能与化合物的化学稳定性高低、反应速度快慢、生成物的产率大小等紧密相关。

20世纪80年代以来，化学键能的实验测量与理论计算的研究，吸引了海外和国内许多科学家，包括科大校园里的张允武、俞书勘、盛六四、齐飞、郭庆祥和傅尧教授等，南开大学程津培和朱晓晴教授等，北京化学所朱启鹤与徐广智教授等，大连化学物理所楼南泉、王秀岩和杨学明教授等，南京大学陈慧兰和张叔仪教授等，清华大学莫宇翔教授等，上海有机化学所、北京大学、南京理工大学、四川大学、重庆大学、吉林大学、复旦大学、上海大学、浙江大学、华中科技大学、中山大学和厦门大学等许多研究梯队，以及台湾省、港澳地区的科学家。

在本书的第2和第3章里，我们将尽量介绍海内外许多科学家的贡献。

作者之一（罗渝然），在旅美期间，建立了一个完整的化学键能数据库，填补了物理学、化学、生物化学和表面科学等领域的重要的“gap”（空白）。

这是中国人有自主知识产权的第一个中型化学专业数据库。

在第4章，我们将讲解该数据库的使用技巧与方法。

## <<现代科学中的化学键能及其广泛应>>

### 内容概要

化学键能是分子科学中的重要物理量。

面对数据互相冲突的现实，如何选用可靠的键能数据来帮助分析和解决科学问题，目前许多科学家、工程师还并不熟悉，国内外也没有相应参考书。

本书填补了这一空白。

本书全面地介绍了有关化学键能的各个方面，包括如何准确理解键能，测量化学键能，计算化学键能，使用化学键能数据库的技巧，以及简单估算化学键能的方法等。

在第6章列举了约三十个实例，阐明了化学键能在现代科学中的重要性。

在研究分子科学的种种问题时，借助于化学键能的概念及可靠数据，可帮助我们分析问题，更快地找到解决问题的途径。

此外，书末还提供了约3500个化学键能的可靠数据。

本书可供化学、化工、物理、材料、表面、能源、生命、资源、环境、海洋、太空等学科的高年级本科生、研究生、教师、科学家、工程师及其他专业人员参考，也可作为研究生相应课程的教材。

## &lt;&lt;现代科学中的化学键能及其广泛应用&gt;&gt;

## 书籍目录

前言第1章 引论 1.1 原子、分子和化学键 1.2 分子中化学键的强弱与分子的化学结构稳定性 1.3 化学键能的定义 1.4 D, De和D。  
的相互关系 1.5 稳定化合物中最弱键能的下限值 1.6 键能规则的适用范围——超快和选键化学第2章  
测量键能的主要实验方法 2.1 反应动力学法 2.2 气相离子的热化学循环和质谱法 2.3 光电离法和零电  
子动能光谱 2.4 同步辐射光电离—分子束质谱法 2.5 光声量热法 2.6 电化学法第3章 计算键能的主要  
理论方法 3.1 概述 3.1.1 分子轨道从头算法 3.1.2 密度泛函法 3.1.3 ONIOM法 3.1.4 半经验法  
3.1.5 常见计算方法的简单评估 3.2 从头算法和密度泛函法预测键能的例子 3.2.1 例1：胺分子XNH<sub>2</sub>  
中的N—H键能 3.2.2 例2：对位取代苯胺分子中的N—X键能 3.3 ONIOM方法预测键能的例子 3.3.1  
例1：芳香族有机化合物 3.3.2 例2：生物抗氧化剂第4章 使用化学键能数据库的技巧 4.1 化学键能数  
据库 4.2 使用键能数据库的基本技巧第5章 有机化合物中键能的简单估计 5.1 碳氢化合物中的C—H键  
能 5.1.1 链状烷烃 5.1.2 链状烯烃 5.1.3 链状炔烃 5.1.4 芳烃 5.2 分子中原子相互作用的物理模型  
5.3 次邻近相互作用 5.4 次邻近兀键的p-兀共轭效应 5.5 位阻效应或张力能释放 5.6 次邻近杂原子  
的p.p共轭效应 5.7 远程共轭效应与Hammett方程 5.8 苯基化合物中的远程共轭效应 5.9 乙烯基、烯丙  
基化合物中的远程共轭效应第6章 化学键能知识的广泛应用 6.1 氟利昂与臭氧层破坏 6.2 二氧化碳  
(CO<sub>2</sub>)和水的化学反应 6.3 太空尘埃丰度与行星大气 6.4 视觉化学 6.5 油炸或烧烤食品产生致癌物  
6.6 辅酶B<sub>12</sub>的催化作用 6.7 细胞色素P450酶的催化氧化 6.8 一氧化碳(CO)中毒 6.9 一氧化氮(NO)  
：祸首与功臣 6.10 材料工业与食品工业中的抗氧化剂 6.11 维生素E清除人体自由基 6.12 人体内的  
抗氧化循环 6.13 DNA与RNA的损伤与修复 6.14 主体分子与客体分子之间的识别 6.15 ATP(腺苷三  
磷酸)水解 6.16 药物设计和QSAR 6.17 簇合物中的逐级键能 6.18 石油形成的新见解 6.19 烯烃复分解  
反应——“绿色化学”的典范 6.20 电子转移与催化作用机理 6.21 聚合的引发和控制 6.22 高能(含能  
)材料 6.23 表面物理吸附 6.24 气—固表面催化 6.25 金属腐蚀 6.26 储氢材料 6.27 燃料电池 6.28 纳  
米材料 6.29 微电子材料结束语参考文献附录1 常见分子和正离子中的化学键能 1.双原子分子中的键  
能 2.多原子分子中的键能 3.双原子正离子中的键能 4.多原子正离子中的键能附录2 能量转换因子

## <<现代科学中的化学键能及其广泛应>>

### 章节摘录

第1章 引论 1.1 原子、分子和化学键在学习和研究物理、化学、生命、材料、表面、能源、资源、环境、海洋、太空等自然学科的过程中，我们都面临一个共同的问题，即物质的化学结构与性质。

虽然目前已知的化学元素只有100余种，但在美国化学会登记和确认了的无机和有机化合物的数目，却已经超过3300万(2008CAS)，而且这数字每天都在增加。

我们能否成为“事前诸葛亮”，来预测化合物、材料或物质的性质？

答案是：能！

1803年，Dalton提出所有物质都是由原子构成的假设。

但原子又是怎样形成分子及化合物的呢？

早期，科学家假设原子和原子之间由一个神秘的钩相互钩住。

这种设想一直延续到今天。

现代的化学键的“键”字仍然保留着最原始“钩”的意思。

现在，化学“钩”（键）的本质已经弄清楚了，原子或原子团之间的相互作用力就是化学键，通常用短线“—”表示，可分为共价键、离子键、配位键、金属键、氢键、静电相互作用、van der Waals力和表面键等。

通过化学键，原子或原子团之间能够稳定地聚集在一起，形成各种各样的分子、“超分子”、络合物或簇合物(cluster)。

当我们设计具有特定性质的化合物、材料或物质时，必须掌握有关化学键的基本知识。

这本书里，我们将探讨分子化学结构的稳定性高低、反应速度的快慢、生成物相对产率的大小等与化学键强弱密切相关的定量关系。

## 后记

化学键的概念已经有两百余年的历史，但化学键能的测量则始于20世纪30年代，那时测量的都是小分子，如H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, HCl等。

1950年，第一次全面总结了多原子分子中化学键能测量数据。

但是，那批数据很快被全面修正了。

最早的化学键能数据库建立于20世纪60至70年代，但这些数据也很快地被全面校正了。

从20世纪80年代中期到现在，许多科学家反复测量了大量重要分子中的化学键能，键能实验数据连续急剧增加，同时测量误差也开始进入“化学精度”（ $\pm 1 \text{ kcal mol}^{-1}$ ，或 $\pm 4.184 \text{ kJ mol}^{-1}$ ）。

同时期，发展了很多理论和半经验方法用于预测化学键能。

推动化学键能知识不断丰富和更新的原动力是人类社会的不断发展。

化学键能知识的不断丰富和更新，不仅促进了物理学和化学的自身发展，而且已经成功地、巧妙地渗透、融合、“杂交”进入了化工、材料、生命、医药、营养、能源、资源、环境、海洋、太空等不同领域，成为这些领域不可缺少的“新朋友”、“好助手”。

全面的化学键能数据库建立于本世纪初。

化学键能数据库，外表看来好像一座“信息山”，而从里看实为一个“信息宝库”，它是数千名科学家长期辛勤劳动与集体合作的结晶。

系统地、细致而全面地开发和利用这一“信息宝库”，科学家们一定能发现更可靠的、更准确的结构-能量-反应活性的新规律，更好地服务于人类社会的发展。

最后，我们诚恳地引用本书前言中的一段文字作为结束语——五十年前，郭沫若校长为科大撰写的校歌里说：“科学的高峰在不断创造。

”我们期待更多年轻科学家，在化学键能、分子化学稳定性与反应活性的研究方面，后来居上，开拓创新。

“长江后浪推前浪，一代新人胜前人”！

## <<现代科学中的化学键能及其广泛应>>

### 编辑推荐

《现代科学中的化学键能及其广泛应用》可供化学、化工、物理、材料、表面、能源、生命、资源、环境、海洋、太空等学科的高年级本科生、研究生、教师、科学家、工程师及其他专业人员参考，也可作为研究生相应课程的教材。

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>