

<<核酸碱基与无机小分子间的相互作用>>

图书基本信息

书名：<<核酸碱基与无机小分子间的相互作用>>

13位ISBN编号：9787118049527

10位ISBN编号：7118049522

出版时间：2006-12

出版时间：国防工业

作者：张士国

页数：198

字数：166000

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>

<<核酸碱基与无机小分子间的相互作用>>

内容概要

本书是作者近三年来部分研究工作的总结，概述了核酸碱基与部分无机小分子之间的相互作用。全书分为7章：第1章简述了前人对核酸基与电子、质子、溶剂等客体相互作用的研究成果；第2章介绍了本书中研究分子间相互作用的研究方法与理论基础；第3章-6章依次讨论了碱基与 BH_3 、 BF_3 、 BCL_3 、 CO 、 NO 之间的作用，给出了分子之间形成的复合物的几何结构、稳定性以及分子之间的作用方式等。

本著作丰富了量子化学对分子间相互作用的研究范围，并给出了核酸碱基与部分无机小分子之间的作用方式。

本书可供无机化学、有机化学、超分子化学、理论与计算化学专业的研究、本科高年级学生和科技工作者参考使用。

<<核酸碱基与无机小分子间的相互作用>>

书籍目录

第1章 绪论 1.1 核酸碱基的正常结构与异构体研究 1.2 碱基与电子作用的研究 1.3 碱基质子化的研究 1.4 碱基与溶剂水分子作用的研究 1.5 碱基与金属离子作用的研究 1.6 碱基与其它客体分子作用的研究 1.7 小结 1.8 我们的工作 参考文献第2章 研究方法及其理论基础 2.1 第一性原理Hartree-Fock近似 2.2 从头计算方法 (ab initio Method) 2.3 密度泛函方法 (DFT) 2.4 分子力学方法和分子动力学方法 2.5 Gaussian98 (03) 程序 参考文献第3章 碱基 - BH₃复合物的研究 3.1 引言 3.2 胸腺嘧啶 - BH₃复合物 3.3 鸟嘌呤 - BH₃复合物 3.4 腺嘌呤 - BH₃复合物 3.5 胞嘧啶 - BH₃复合物 3.6 尿嘧啶 - BH₃复合物 参考文献第4章 碱基 - BX₃ (X=F, Cl) 复合物的研究 4.1 引言 4.2 鸟嘌呤 - BX₃ (X=F, Cl) 复合物 4.3 腺嘌呤 - BX₃ (X=F, Cl) 复合物 4.4 胞嘧啶 - BX₃ (X=F, Cl) 复合物 4.5 尿嘧啶 - BX₃ (X=F, Cl) 复合物 参考文献第5章 碱基 - CO复合物的研究第6章 碱基 - NO复合物的研究第7章 主要结论与展望

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>