第一图书网, tushu007.com

<<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

第一图书网, 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BH3、BF3、BCL3、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。

第一图书网, tushu007.com

<<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 ignition Method）　2.3　密度泛函方法（DET）　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

第一图书网, tushu007.com

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