

评介《硝基化合物的分子轨道理论》

陈博仁

(北京理工大学化工与材料学院)

《硝基化合物的分子轨道理论》一书为南京理工大学肖鹤鸣教授所著。该书获得国防科技优秀图书出版基金资助,由国防工业出版社于1993年7月出版。著名理论化学家唐敖庆教授为该书作了序。

全书分两篇共十章。除第一章简介分子轨道理论方法外,其余九章都是作者自身科研工作的结晶,并通过理论计算,结合实验事实,探讨了硝基和硝胺类化合物(二至七章)以及硝酸酯类化合物(八至十章)结构与性能之间的规律与联系。

综观全书,作者运用了国际上流行的从头计算和各种半经验计算方法(如HMO、EHMO、EH-CO、CNDO/2、INDO、MINDO/3、MNDO、AMI等),计算研究了多系列、数百种化合物的晶体、分子、离子、游离基、中间体和过渡态,阐明它们的各种物理和化学性质,例如分子构型、构象及稳定性、酸碱性、导电性、偶极矩、电极电位以及红外、紫外、核磁、水解和热解反应等;尤其还包括硝化硝解、Mannich反应、感度和安定性等涉及含能材料合成和爆炸的特殊性质,具有很强的科学性、针对性和实用性。

我很赞同唐先生在序言中的评语,这本书“内容丰富,很有特色,有较高学术水平...”。我觉得还应补充一句,这本书不仅在国内,而且在国外,也属于至今所见第一本相当全面、系统的含能材料量子化学专著,填补了国内外空白。

过去的炸药化学著作和教材都是以经典有机理论为基础,多是经验规律的总结。而该书的出版,将使我们的研究工作深入到分子层次,进入更高的理论境界,故对火炸药的合成和性能研究有着重大的指导意义,是对含能材料研究事业的重大贡献,具有深远的意义和影响。此外,该书对其它化学领域学习和应用分子轨道理论也会有很大帮助,因为该书涉及分子轨道方法之多及其应用方面之广都是很突出的,是一本可读性很强和值得推荐的好书。