

<<化工工艺与工程研究方法>>

图书基本信息

书名：<<化工工艺与工程研究方法>>

13位ISBN编号：9787030211989

10位ISBN编号：7030211987

出版时间：2008-5

出版时间：科学出版社

作者：张玉清 等编著

页数：229

字数：290000

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>

<<化工工艺与工程研究方法>>

内容概要

本书共分8章，根据科研与生产实践的一般规律，以化工产品开发的过程为顺序，依次介绍文献调研方法、分子设计与模拟、试验设计与方法、检识与测量技术、过程模拟与放大、原创知识产权产生与保护、产品与技术标准的制定与规范化。

本书的侧重点在于介绍化工工艺与工程领域研究方法的最新进展，同时，对传统的研究方法进行了简要的介绍。

读者通过阅读本书不但可以了解化工工艺与工程研究方法的最新进展，同时，还可以了解化工产品的开发过程与研究思路。

本书除作为高等院校化工类专业高年级本科生及研究生教学用书外，还可供有关科研机构、生产企业的科技人员参考。

<<化工工艺与工程研究方法>>

书籍目录

前言第1章 绪论 1.1 化工工艺与工程研究内容 1.2 化学工艺与工程研究方向 1.2.1 绿色化工与可持续化学 1.2.2 多学科交叉与过程优化 1.2.3 在线分析技术 1.2.4 微反应技术 1.2.5 过程强化第2章 化学化工文献调研 2.1 文献信息分类 2.1.1 期刊类文献 2.1.2 题录类文献 2.1.3 文摘类文献 2.1.4 专利类文献 2.1.5 图书类文献 2.2 论文文献检索方法 2.2.1 文摘检索介绍 2.2.2 全文检索介绍 2.3 专利文献检索方法 2.3.1 国内专利检索系统 2.3.2 国外专利检索系统 2.4 因特网上其他化学化工资源 2.4.1 化学化工导航系统 2.4.2 化学化工虚拟社区 2.4.3 有机合成数据库第3章 分子设计与模拟 3.1 概述 3.1.1 量子力学与量子化学 3.1.2 分子力学和分子动力学 3.2 分子模拟基本原理 3.2.1 分子轨道理论 3.2.2 分子模拟在QSAR / QSPR方法中的应用 3.3 分子模拟软件与应用 3.3.1 Hyperchem软件 3.3.2 Gaussian软件 3.3.3 ADF软件 3.3.4 Alchemy软件 3.3.5 WLViewerPro Trial软件 3.3.6 RasMol软件 3.3.7 合成路线设计软件第4章 试验设计与方法 4.1 概述 4.1.1 试验设计方法起源 4.1.2 试验设计方法的地位和意义 4.1.3 试验设计方法中的变量 4.1.4 因素和水平的选择 4.2 传统试验设计与方法 4.2.1 正交试验设计方法 4.2.2 均匀试验设计方法 4.2.3 正交试验设计方法与均匀试验设计方法的比较 4.3 计算机在试验设计中的应用 4.3.1 正交试验设计软件 4.3.2 均匀试验设计软件 4.3.3 其他辅助软件 4.3.4 遗传算法在神经网络中的应用 第5章 检识与测量技术 5.1 概述 5.2 快速分离与测量 5.2.1 色谱法概述 5.2.2 气相色谱技术及应用 5.2.3 液相色谱技术及应用 5.2.4 凝胶色谱技术及应用 5.2.5 高速逆流色谱技术及应用 5.2.6 质谱分析技术及应用 5.2.7 色谱-质谱联用技术及应用 5.2.8 其他分离测试技术及应用 5.3 在线测量技术 5.3.1 在线近红外光谱分析技术 5.3.2 在线色谱分析技术 5.3.3 在线X射线衍射分析和核磁共振技术 5.3.4 激光多普勒流速仪在线测试技术 5.4 超临界流体色谱 5.4.1 超临界流体色谱的特点 5.4.2 超临界流体色谱的流动相及固定相 5.4.3 超临界流体色谱的分类及应用 第6章 过程模拟与放大 6.1 概述 6.2 过程模拟 6.2.1 数学模拟的一般方法 6.2.2 流程模拟 6.2.3 单元设备模拟 6.3 过程模拟软件应用 6.3.1 化工软件的概述 6.3.2 Aspen Plus软件的应用 6.3.3 Fluent软件的应用 6.3.4 实际开发中的应用 6.4 过程优化 6.4.1 过程优化问题的概述 6.4.2 最优化方法简介 6.5 展望第7章 原创知识产权产生与保护 7.1 概述 7.1.1 知识产权的概念 7.1.2 知识产权保护的重要性 7.1.3 专利授予条件 7.2 专利申请的程序 7.2.1 专利申请的原则 7.2.2 专利申请文件的种类及要求 7.2.3 专利文件的递交 7.2.4 各种文件的要求 7.2.5 专利申请的审批程序 7.2.6 专利权的撤销、复审与无效 7.2.7 专利权的保护第8章 产品与技术标准的制定与规范化 8.1 概述 8.2 标准的种类 8.3 标准的制定方法与程序 8.3.1 标准的构成 8.3.2 标准的编写要求 8.3.3 企业标准的制定要求 8.4 危险化学品安全标准体系 8.5 国际标准体系简介 8.5.1 ISO9000质量管理国际标准体系 8.5.2 ISO14000环境管理国际标准体系符号说明

章节摘录

第3章 分子设计与模拟 3.1 概述 3.1.1 量子力学与量子化学 3.1.1.2 量子化学 量子化学是应用量子力学的基本原理和方法研究化学问题的化学分支学科。它以量子力学为理论基础，以计算机为主要计算工具来研究物质的微观结构与宏观性能的关系，用以解释物质和化学反应所具有的特性的内在本质及其规律性。量子化学的研究范围包括：稳定和不稳定分子的结构、性能及其结构与性能之间的关系；分子与分子之间的相互作用；分子与分子之间的相互碰撞和反应等问题。1927年，Heitler和London开创性地把量子力学基本原理用于处理氧分子结构问题，定量地阐释了两个中性原子形成化学键的原因，成功地开始了量子力学和化学的结合。标志着一门新兴的化学分支学科——量子化学的诞生。量子化学的创立，既是现代物理学实验方法和理论（量子力学原理）不断渗入化学领域的结果，也是经典化学向现代化学发展的历史必然。

量子化学的发展历史可分两个阶段：第一个阶段是1927年到20世纪50年代末，这是量子化学的创建时期。其主要标志是三种化学键理论（价键理论、分子轨道理论和配位理论）的建立和发展及分子间相互作用的量子比学研究。价键理论是由Pauling在Heitler和London的氢分子结构工作的基础上发展而成的，其图像与经典原子价理论接近，被化学家所普遍接受。分子轨道理论是在1928年由Mulliken等首先提出的，Hückel于1931年提出了简单分子轨道理论，这些对早期处理共轭分子体系起着重要作用。分子轨道理论计算较简便，又得到光电子能谱实验的支持，这使它在化学键理论中占主导地位。配位场理论由Bethe等于1929年提出，最先用于讨论过渡金属离子在晶体场中的能级分裂，后来又与分子轨道理论结合，发展成为现代的配位场理论。三种化学键理论虽然建立得较早，但至今仍在不断发展、丰富和提高之中，它与结构化学和合成化学的发展紧密相连、互相促进。

· · ·

<<化工工艺与工程研究方法>>

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>