

<<宏观分子相互作用理论>>

图书基本信息

书名：<<宏观分子相互作用理论>>

13位ISBN编号：9787543952119

10位ISBN编号：7543952114

出版时间：2012-3

出版时间：张福田 上海科学技术文献出版社 (2012-03出版)

作者：张福田

页数：659

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>

<<宏观分子相互作用理论>>

内容概要

宏观分子间相互作用理论是讨论大量粒子体系中分子间相互作用, 由此在微观分子间相互作用理论基础上, 找出宏观性质的统计规律性, 即找出宏观性质的微观结构, 作为分析、解释、改变宏观性质的微观依据。

《宏观分子相互作用理论: 基础和计算》以宏观性质压力为讨论主线, 集聚了众多实际数据, 制成图、表对理论讨论作了明确说明, 将《宏观分子相互作用理论: 基础和计算》理论观点与实际数据结合起来, 成为具有特色的分子间相互作用理论专著。

全书共八章, 前两章介绍微观的和宏观的分子间相互作用理论, 第三章讨论分子间相互作用与宏观性质的统计力学关系。

后五章是分子压力理论, 介绍分子压力的导出, 分子压力与宏观性质"压力"的关系, 分子压力理论在纯物质、气体和液体混合物的应用。

提出了分子压力分为分子动压力和分子静压力两种概念, 在液体混合物--溶液讨论中提出溶液条件以区别不同类型的溶液, 并以物理界面相平衡理论明确地解释溶液成为理想溶液的微观因素。

《宏观分子相互作用理论: 基础和计算》可作为高等院校理工科(如物理、化学、化工、能源、生物、药学、材料、冶金、等)有关专业的大学教师、高年级大学生和研究生的教、学参考书, 也可供有关科研人员、工程技术人员参考。

<<宏观分子相互作用理论>>

书籍目录

第一章微观分子间相互作用 1—1各种分子间相互作用 1—1—1第一类分子间相互作用 1—1—2第二类分子间相互作用 1—1—3第三类分子间相互作用 1—2长程力 1—2—1静电力 1—2—2极性分子间相互作用（偶极力） 1—2—3极性分子与非极性分子相互作用（诱导作用力） 1—2—4非极性分子与非极性分子相互作用（色散作用力） 1—2—5总vanderWaals力 1—3其他分子间力 1—3—1氢键力 1—3—2金属键力 1—3—3其他相互作用 1—4不同物质间分子间力 第二章宏观分子间相互作用 2—1分子间力的加和性特性 2—1—1第一类分子间相互作用加和性 2—1—2第二类分子间相互作用加和性 2—2大量分子体系中分子间的相互作用 2—2—1大量分子的影响 2—2—2异类分子的影响 2—2—3分子体积的影响 2—2—4局部组成概念 2—3宏观长程力基本概念 2—3—1基本概念 2—3—2静电长程力 2—3—3中间分子的影响 2—3—4界面分子对界面另一侧分子的影响 2—3—5同一相内分子对界面分子的影响 2—3—6大量分子系统中长程色散力 2—4宏观状态与微观状态 2—4—1气态物质 2—4—2气体的微观模型 2—4—3液态物质 2—4—4液体分子动压力 2—4—5液体分子静压力 第三章宏观分子间相互作用统计力学基础 3—1统计规律性 3—1—1统计平均值 3—1—2涨落 3—1—3统计平均值的加和性（1） 3—1—4统计平均值的加和性（2） 3—2配分函数 3—2—1分布 3—2—2三种系综分布函数 3—2—3最可几分布 3—2—4配分函数 3—2—5热力学量与配分函数 3—2—6静态分子间相互作用 3—3分子间相互作用与宏观性质 3—3—1分子间相互作用与物质性质 3—3—2表面张力 3—3—3压力 3—4径向分布函数与无序、有序结构 3—4—1无序结构与有序结构的能量 3—4—2无序结构与有序结构的压力 3—4—3Ornstein—Zernike方程 第四章分子压力 4—1分子压力的基本概念 4—2分子压力计算 4—2—1立方型状态方程讨论 4—2—2立方型状态方程改进 4—3分子压力与立方型状态方程 第五章纯物质气相分子压力 5—1压缩因子与分子压力 5—2纯物质气体分子压力 5—2—1恒温过程 5—2—2恒压过程 5—2—3恒容过程 5—3气相分子压力的影响因素 5—3—1各种物质分子压力 5—3—2温度的影响 5—3—3压力的影响 5—3—4气相分子压力讨论 5—4逸度与分子压力 5—4—1逸度及逸度系数 5—4—2气体逸度 5—4—3饱和气体逸度与分子压力 5—4—4过热气体逸度与分子压力 第六章气体混合物的分子压力 6—1气体混合物分子压力 6—1—1理想气体混合物分子压力 6—1—2真实气体混合物分子压力 6—2气体混合物的混合规则 6—2—1理想气体混合规则 6—2—2真实气体混合规则 6—2—3真实气体分子压力混合规则 6—2—4临界参数混合规则 6—2—5临界分子压力混合规则 6—2—6对比态参数混合规则 6—3Virial方程与分子压力 6—3—1Virial方程 6—3—2Virial方程与分子压力 6—3—3Virial方程讨论 6—3—4Virial方程统计理论讨论 6—4气体混合物有效压力 6—4—1饱和状态混合气体有效压力的混合规则 6—4—2过热状态混合气体有效压力混合规则 第七章液体分子压力 7—1液体的分子压力 7—1—1分子动压力和分子静压力 7—1—2分子动压力的热力学行为 7—2液体分子动压力及其影响因素 7—2—1饱和液体 7—2—2压缩液体 7—2—3液体压缩因子与分子压力 7—3分子静压力的基本概念 7—3—1移动分子与定居分子 7—3—2气态与液态 7—3—3液体近程有序结构 7—3—4分子内压力 7—3—5液体分子内压力平衡 7—4液体有效压力与分子内压力 7—4—1饱和液体的逸度 7—4—2分子内压力对液体逸度的影响 7—4—3分子内压力与分子吸引压力 7—4—4有效分子内压力 7—4—5压缩液体逸度与分子压力 7—4—6压缩液体的分子内压力 7—5分子内压力的影响因素 7—5—1分子内压力与温度 7—5—2分子内压力与压力 7—6Virial方程对液体的应用 7—6—1液体Virial方程 7—6—2液体Virial系数与分子压力 7—6—3气体与液体Virial总系数的比较 7—7分子协体积讨论 7—7—1分子协体积的基本概念 7—7—2温度与分子协体积 7—7—3分子协体积计算方法 7—7—4分子协体积计算 第八章溶液分子压力 8—1溶液分子间相互作用 8—1—1多分子间相互作用 8—1—2液体结构 8—2溶液理论基础 8—2—1经典热力学理论 8—2—2经典Gibbs相平衡理论 8—2—3溶液表面现象理论 8—2—4溶液统计力学理论 8—2—5溶液相问平衡、相内平衡 8—3溶液 8—3—1理想溶液条件 8—3—2完全理想溶液 8—3—3近似理想溶液 8—3—4完全理想溶液分子压力 8—3—5近似理想溶液分子压力 8—3—6实际溶液分子压力 附录 附录1符号表 附录2饱和气、液体的对比分子压力（273.15K） 附录3纯物质液体和气体的Virial系数 附录4溶液条件

<<宏观分子相互作用理论>>

章节摘录

版权页：插图：依据上述文献的意见和金属所具有的一些特性，对于金属物质，可能存在的作用力为：金属物质独有的金属键、受到外电场的影响而形成的诱导作用力、自由电子无规则的运动而形成的色散作用力。

1—3—3其他相互作用 Fowkes认为：表面张力是由下列各种“相互作用”，所组成的：表面自由能与分子间相互作用有关，从分子间相互作用的角度出发，分子间相互作用总的能量亦应是由这些分子间相互作用所组成：这就给分子理论的讨论带来困难，对一种物质要讨论这么多类型的相互作用，分析每一种相互作用对总的相互作用的贡献，了解每种相互作用的本质及它们间相互关系等，这在某种程度上是有一定困难的。

为此，国外一些研究者对这些相互作用作了一些归纳、总结工作。

目前国外文献中存在两种不同的处理方法：其一，Fowkes曾将各项分子间相互作用简化成二项，即色散力对分子间相互作用力的贡献和非色散力对分子间作用力的贡献。

在表面张力表示式中则体现为液相表面张力为色散力 d 组成的表面张力分力（我们称为色散表面力）和非色散力 n 表面张力分力（非色散表面力）方和：其二，亦有一些作者，例如Busscher和Arends，认为液相表面张力为色散（ d ）表面力和极性（ P ）表面力之和：张开认为，总引力常数也可将各种极化能（包括偶极、诱导和氢键能）归并成一项来计算，即：Fowkes[40~43]在1978年以后提出将诱导力、偶极力和氢键力三项组合成一项，即酸—碱作用力，其表面张力表示式为：综合以上讨论，可知Fowkes对分子间相互作用的最主要的看法是色散力，并认为色散力存在于一切物质的相互作用之中。

Fowkes曾针对不同相互作用对象提出一些不同的分子间相互作用的表示式，但在其所有的表示式中总是存在色散力这项分子间作用力。

Fowkes的这些讨论表明分子间非极性相互作用与极性相互作用对液体和固体表面张力的贡献是非常重要的。

但亦有一些研究者对所谓“极性”概念有不同的理解。

其中较著名的研究者van Oss、Chaudhury和Good[4]认为，有三种不同类型的化合物存在分子间极性相互作用：（1）A种。

偶极化合物，这类物质具有明显的偶极矩。

（2）B种。

氢键类化合物，这类化合物可以用Bronsted（质子给体和质子受体）酸碱理论处理。

再细分有以下物质：B1种。

是质子给体（酸）又是质子受体（碱）类物质，如水。

van Oss他们称之为双极类化合物。

B2种。

该类物质作为质子给体（酸）来讲要比作为质子受体（碱）类物质更为有效，例如 CHCl_3 。

B3种。

该物质作为质子受体（碱）来讲要比作为质子给体（酸）类物质更为有效，如丙酮。

<<宏观分子相互作用理论>>

编辑推荐

《宏观分子相互作用理论:基础和计算》将以宏观性质中的压力和微观性质中的各种分子压力为主线,将宏观分子间相互作用研究中涉及的宏观性质、统计规律性、微观结构对宏观性质及其变化规律的影响等相关内容串联起来,从而使《宏观分子相互作用理论:基础和计算》内容不仅是单纯的理论探讨,而且使理论与实践联系起来。

书内列有很多计算实例与图表,便于读者阅读与理解。

<<宏观分子相互作用理论>>

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>