

<<大分子设计与实验>>

图书基本信息

书名：<<大分子设计与实验>>

13位ISBN编号：9787562529200

10位ISBN编号：7562529205

出版时间：2012-9

出版时间：中国地质大学出版社

作者：罗文君，卜庭江 编著

页数：254

字数：422000

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>

<<大分子设计与实验>>

内容概要

《大分子设计与实验》介绍了大分子、大分子材料、大分子设计的基础知识以及实验设计、实验数据处理方法等方面的内容。

着重叙述了基团贡献法对大分子性能设计的具体方法，突出了数理方法和计算机技术应用的内容。以教学实验的形式，对于专业软件的应用、实验设计、Monte Carlo与神经网络的应用原理作了实例讲解，公开了所有计算程序的代码。

《大分子设计与实验》是为材料化学专业本科生编写的教材，也可作为高分子相关专业的本科生和研究生的参考教材。

本书由罗文君，卜庭江编著。

<<大分子设计与实验>>

书籍目录

绪言

- 一、高分子与大分子
- 二、大分子设计
- 三、实验与实验设计

第一篇 大分子设计基础

第一章 大分子结构、模型与类别

第一节 大分子结构及其表征

- 一、大分子结构及其表征
- 二、一次结构
- 三、二次结构
- 四、三次结构
- 五、四次结构

第二节 大分子结构及其模型

- 一、大分子链结构及其模型
- 二、大分子聚集态结构及其模型

第三节 天然大分子及设计层面上的研究

- 一、天然大分子及其衍生物
- 二、天然大分子的形成机理及构效关系是大分子设计的重要依据
- 三、三类主要天然大分子

第四节 含无机元素的大分子、无机高分子及矿物聚合物

- 一、大分子中无机元素的引入
- 二、侧基含无机元素
- 三、主链含无机元素
- 四、无机高分子
- 五、矿物聚合物

第二章 大分子物理特性的定量计算

第一节 分子量及均方末端距

- 一、分子量及其统计意义
- 二、分子量分布
- 三、大分子链尺寸及其表示

第二节 密度与大分子堆砌系数

第三节 内聚能、溶度参数及杨氏模量

第四节 玻璃化转变温度、熔点

第五节 大分子的光学性能及光特性值计算

- 一、大分子光学性能的研究意义
- 二、大分子的光学性能
- 三、大分子光特性值的计算

第三章 大分子设计的依据与方法

第一节 大分子设计依据

- 一、骨架与性能
- 二、侧基与性能
- 三、结构与表面性能和固态性能

第二节 大分子设计方法

- 一、直接组合法
- 二、逻辑中心法(合成树)

<<大分子设计与实验>>

三、分子力学与量子化学方法

四、数学模拟法

第四章 大分子实验基础

第一节 天然大分子基础实验

一、蛋白质的性质

二、酶的催化特异性与失活

三、纤维素的水解

第二节 高分子合成原理与方法

一、连锁增长聚合

二、逐步增长聚合

三、共聚合

第三节 高分子材料合成的方法选择

一、本体聚合和溶液聚合

二、悬浮聚合和乳液聚合

三、熔融缩聚和溶液缩聚

四、界面缩聚和固相缩聚

第四节 大分子基本实验技术

一、玻璃仪器的清洁干燥和保管

二、加热、干燥、冷却与冷凝

三、蒸馏与分离

四、单体与引发剂精制

第五章 实验设计及相关数据处理

第一节 大分子实验的任务与层次

一、大分子实验的特点与要求

二、大分子实验所涉及内容

第二节 实验设计(DOE)

一、实验设计(DOE)的概念

二、实验设计的相关术语

三、实验设计要素

四、实验设计的原则

第三节 大分子实验设计的类型

一、实验类型及相应的实验设计

二、实验设计方法

第四节 常用的实验数据处理与分析

一、方差分析及其计算的软件实现实例

二、回归分析及其计算的软件实现实例

第二篇 大分子设计与实验实例

第六章 利用化学软件进行的模拟实验

实验1 单体结构式的构造及性能参数的理论计算

实验2 分子最小能量及红外、核磁共振谱的模拟计算

实验3 天然大分子的结构构建与参数计算

实验4 合成高分子的结构构建与动力学模拟

实验5 利用软件MP计算大分子链的末端距

实验6 大分子构象能的计算

第七章 基于模型描述的实验

实验7 大分子链二维构象的Monte Carlo模拟

实验8 大分子流体力学参数的计算

<<大分子设计与实验>>

实验9 水性聚氨酯的配方设计与动态计算

实验10 粘度法测聚合物分子量及过程计算

实验11 大分子溶液体系溶度参数与Mark-Houwink指数 关系的神经网络模型的构建和模拟

实验12 交联聚丙烯酸(盐)溶胀度模型的构建

第八章 基于大分子理论性能设计的实验

实验13 基团贡献法对塑料光纤材料的设计

实验14 共聚交联大分子溶胀度的控制模型

实验15 多元共聚物加和性性能参数的动态计算

实验16 药用热敏大分子载体的相变点设计

第九章 基于实验参数的设计性实验

实验17 N-乙烯基吡咯烷酮的交联聚合及溶胀度-交联度的关系模型

实验18 悬浮聚合中产物粒径控制模型的实例验证

实验19 拟水平、交互因子及综合指标的实验设计

参考文献

<<大分子设计与实验>>

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>