第一图书网, tushu007.com

<<煤自燃量子化学理论>>

图书基本信息

书名：<<煤自燃量子化学理论>>

13位ISBN编号：9787030192837

10位ISBN编号：7030192834

出版时间：2007-7

出版时间：科学

作者：王继仁

页数：400

字数：502000

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

<<煤自燃量子化学理论>>

内容概要

本书总结了作者近年来在煤自燃理论方面的最新研究成果。
以量子化学的理论和方法为基础，并以实验为研究手段从微观角度系统研究了煤的化学结构，煤表面对氧分子及多组分气体的物理吸附机理，煤表面对氧分子的化学吸附机理，煤中有机大分子和低分子化合物发生氧化自燃的化学反应机理和化学反应过程，建立了煤自燃机理理论。
并用实验的方法进行了验证。
　本书可作为高等院校矿业、煤化工等专业的研究生教学用书，同时也可作为煤炭、煤化工行业科研和工程技术人员的参考书。

<<煤自燃量子化学理论>>

书籍目录

前言第1章 绪论 1.1 煤自燃理论 1.2 煤的分子结构 1.3 煤自燃与吸附 1.4 煤自燃过程的化学反应理论 参考文献第2章 理论和研究方法 2.1 Schrodinger方程及近似 2.2 分子轨道理论 2.3 电子相关与多体微扰理论 2.4 密度泛函理论 2.5 振动频率的计算 2.6 化学反应路径IRC近似 参考文献第3章 煤的分子结构 3.1 煤的化学结构模型 3.2 煤结构的红外光谱研究 3.3 煤分子化学基本结构单元的量子化学计算 3.4 结论 参考文献第4章 煤分子对氧分子的吸附 4.1 引言 4.2 吸附与煤的表面 4.3 计算方法与模型 4.4 对氧分子的物理吸附 4.5 含硫、磷侧链基团对氧分子的物理吸附 4.6 对氧分子的化学的吸附 4.7 物理吸附与化学吸附的临界位置 4.8 结论 参考文献第5章 煤中有机大分子与氧发生化学反应机理研究 5.1 煤分子易与氧化发生化学反应的部位及其化学反应 5.2 计算方法 5.3 煤分子氧化自燃生成甲烷的反应的计算结构讨论 5.4 煤分子氧化自燃生成二氧化碳和水的反应的计算结果讨论 5.5 灶分子氧化自燃生成一氧化碳和水的反应的计算结果讨论 5.6 煤分子氧化自燃生成乙烯反应的计算结果讨论 5.7 煤分子氧化自然生成水反应的计算结果讨论 5.8 通道竞争性的讨论 5.9 煤氧化自然机理结论 参考文献第6章 煤结构中低分子化合物氧化自然的反应机理 6.1 引言 6.2 研究和计算方法 6.3 烷烃类低分子化合物自然反应机理 6.4 酮类低分子化合物自然反应低理 ……第7章 煤氧化自然机理的实验研究参考文献

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