第一图书网, tushu007.com

<<高等化工热力学>>

图书基本信息

书名：<<高等化工热力学>>

13位ISBN编号：9787302232100

10位ISBN编号：7302232105

出版时间：2010-9

出版时间：清华大学出版社

作者：高光华

页数：285

字数：359000

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

前言

本书是为化学工程与生物化工专业研究生“高等化工热力学”课程教学编写的教材。
就其知识内容而言，实为一本有关分子热力学方面的著作。
作者在清华大学化工系从事本科生和研究生热力学课程教学多年，本科化工热力学教学日臻成熟，已有配套的教材、习题集和数据手册出版，但深感研究生教学缺少一本深浅适度的教学参考书。
有鉴于此，作者在多年校内试用讲义的基础上，参阅国内外各种教材、专著和文献，结合近年来分子热力学研究的前沿进展以及我们自己的科研工作，编著了本书。
近20年来，化学工程学科的发展日新月异，其研究对象已从传统化工的小分子流体扩展到电解质溶液和离子液体、长链高分子溶液、胶体溶液、生物大分子溶液、聚电解质溶液、亲水亲油分子流体、多分散体系以及多孔材料中的受限空间流体等。
研究这些复杂流体的物性和相行为，宏观热力学方法已显得力不从心。
而建立在统计热力学和分子科学基础之上，又有实验数据支撑的分子热力学方法已成为研究复杂流体结构和热力学性质的有力工具。
统计热力学可以看作联系物质微观分子结构和宏观性质的桥梁，人们仅从流体的微观分子位能函数出发，运用统计力学方法，即可预测流体的热力学性质和相行为。
随着人们对分子间作用力的认识不断深入和基于统计热力学的分子理论的日臻完善，统计热力学处理的对象早已不局限于像惰性气体氩这样的简单分子，而是涉及到上面所述及的所有复杂流体。
随着近年来高速电子计算机的普及，构筑于统计热力学基础之上的分子模拟技术已不再是少数人掌握的阳春白雪，其在化学工程各个研究领域的应用渐成寻常之事。
以上诸因素有力地促进了这门新的工程科学——分子热力学——发展。
因此对化学工程师而言，掌握分子热力学知识，从微观分子观点处理复杂工程问题具有与时俱进的必要性。

内容概要

本书在系统讲述统计热力学原理及方法的基础上，详细介绍了统计热力学在流体状态方程、电解质溶液、高分子溶液和生物大分子溶液各领域中的应用和最新进展。
全书共9章，第1章简要总结了必备的热力学基础知识。
第2-4章分别深入地讲述流体的分子力和位能函数、系综原理和分布函数等统计热力学基本内容。
第5章系统阐述立方型方程、对应态方程、维里方程和硬球方程及其统计力学处理方法。
第6章介绍了适用于化学工程的微扰理论。
第7-9章详细讲述了电解质溶液、高分子溶液和生物大分子溶液的分子热力学理论和模型，并介绍其前沿领域的最新进展。
　本书可作为化工、化学、生物、环境及热能等专业研究生热力学课程的教学参考书，也可供本科高年级学生和有关科研人员参考使用。

作者简介

高光华 1970年毕业于清华大学工程化学系并留校任教至今。
1993年获法国波城大学博士学位。
现任清华大学化学工程系教授，博士生导师，清华大学化工热力学研究室主任。
兼任中国工程热物理学会工程热力学专业委员会委员，中国金属学会物理化学专业委员会委员。
一直从事化工

<<高等化工热力学>>

书籍目录

第1章 基础热力学 1.1 热力学基本方程 1.2 雅可比行列式 1.3 剩余函数和超额函数 1.3.1 剩余函数 1.3.2 超额函数 1.4 逸度和逸度系数 1.4.1 纯气体的逸度 1.4.2 混合物中组分的分逸度 1.5 活度和活度系数 1.6相平衡关系 1.6.1 气液相平衡 1.6.2 液液相平衡 参考文献第2章 分子间作用能和位能函数 2.1 分子间作用能 2.1.1 离子间静电能 2.1.2 偶极分子 偶极分子相互作用能 2.1.3 极性分子与非极性分子间的诱导能 2.1.4 非极性分子间的色散能 2.1.5 分子间的排斥能 2.2 位能函数 2.2.1 硬球位能函数 2.2.2 方阱位能函数 2.2.3 萨日兰位能函数 2.2.4 Lennard Jones位能函数 2.2.5 Kihara位能函数 2.2.6Yukawa位能函数 2.2.7Stockmayer位能函数 2.2.8分子力场 参考文献第3章 统计系综 3.1 正则系综 3.1.1 正则系综与正则配分函数 3.1.2 正则配分函数与热力学量的关系 3.1.3 正则配分函数在经典统计力学相空间中的形式 3.2 巨正则系综 3.2.1 巨正则系综和巨正则配分函数 3.2.2 巨正则系综配分函数与热力学量的关系 3.3 微正则系综 3.4 等温等压系综 3.5 涨落 3.5.1 正则系综中体系能量的涨落 3.5.2 巨正则系综中体系粒子数的涨落 3.5.3 等温等压系综中体系体积的涨落 参考文献第4章 分布函数理论 4.1 分布函数 4.2 径向分布函数 4.3 径向分布函数与流体热力学性质的关系 4.3.1 能量方程 4.3.2 压力方程 4.3.3 压缩性方程 4.4 径向分布函数的理论计算 4.4.1 Ornstein Zernike积分方程 4.4.2 Percus Yevick方程 4.4.3 超网链方程 4.4.4 平均球近似方法 参考文献第5章 流体状态方程 5.1 立方型状态方程 5.1.1 普遍化van der Waals配分函数 5.1.2 纯流体状态方程 5.1.3 立方型方程的混合规则 5.2 对应状态原理 5.2.1 宏观对应态 5.2.2 对应态的分子理论 5.3 维里状态方程 5.3.1 维里方程的统计力学基础 5.3.2 由分子间位能函数计算第二维里系数 5.3.3 第二维里系数的估算 5.4 硬球状态方程 5.4.1 纯硬球流体状态方程 5.4.2 硬球流体混合物状态方程 参考文献第6章 液体的微扰理论 6.1 微扰理论基本原理 6.2 基于硬球参考体系的一阶微扰理论 6.2.1 一阶微扰理论的热力学函数表达式 6.2.2 简单的一阶微扰方法 6.3 微扰状态方程 6.3.1 van der Waals方程 6.3.2 微扰硬链方程 6.3.3 微扰软链方程 6.3.4 硬球链方程 6.4 Barker Henderson微扰理论 6.4.1 软球参考体系的一阶微扰理论 6.4.2 二阶Barker Henderson微扰理论 6.4.3 混合物的Barker Henderson微扰理论 6.5 Chandler Weeks Anderson微扰理论 6.5.1 实际软球参考体系的微扰理论 6.5.2 混合物的CWA理论 参考文献第7章 电解质溶液 7.1 电解质溶液的基本概念 7.1.1 参考态与标准态 7.1.2 电解质活度与离子活度的关系 7.1.3 电解质溶液的渗透系数 7.1.4 电解质溶液的渗透系数和平均离子活度系数与超额Gibbs自由能的关系 7.1.5 电解质溶液理论的分类 7.2 Debye H ü ckel理论 7.2.1 离子氛 7.2.2 Debye H ü ckel活度系数方程 7.3 Pitzer电解质溶液理论 7.3.1 Pitzer方程的统计力学基础 7.3.2 单-电解质溶液的Pitzer方程 7.3.3 混合电解质溶液的Pitzer方程 7.4 电解质溶液局部组成模型 7.4.1 单-电解质溶液的CHEN NRTL方程 7.4.2 混合电解质 混合溶剂体系的CHEN NRTL方程 7.4.3 其他电解质溶液局部组成模型简介 7.5 电解质溶液的原始平均球近似模型 7.5.1 电解质溶液原始平均球近似方法 7.5.2 平均球近似方法计算离子活度系数 7.6电解质溶液的非原始平均球近似模型 参考文献第8章 高分子溶液 8.1 格子模型：Flory Huggins方程 8.1.1 无热溶液的Flory Huggins方程 8.1.2 非无热溶液的Flory Huggins方程 8.1.3 高分子溶液的液液平衡 8.1.4 Flory Huggins方程的改进 8.2 胞腔模型：Prigogine Flory Patterson方程 8.2.1 纯流体的状态方程 8.2.2 二元混合物的状态方程 8.3 统计缔合流体理论：SAFT方程 8.3.1 纯流体的SAFT方程 8.3.2 混合物的SAFT方程 8.3.3 SAFT方程在相平衡中的应用 8.3.4 SAFT方程的改进 参考文献第9章生物大分子溶液 9.1 生物大分子溶液的带电胶体性质 9.1.1 聚电解质溶液的双电层结构 9.1.2 DLVO理论 9.1.3 聚电解质溶液的Donnan平衡 9.2 McMillan Mayer渗透压统计理论 9.3 蛋白质溶液的渗透压 9.3.1 维里方程法 9.3.2 Yukawa状态方程法 9.3.3 积分方程法 9.4 蛋白质溶液的扩散 9.4.1 一般化Stokes Einstein方程 9.4.2 BSA 电解质水溶液互扩散系数的预测 9.5 蛋白质在双水相体系中的分配 9.5.1 扩展的渗透维里方程 9.5.2 Baskir吸附格子模型及其扩展 9.6 DNA电解质溶液的结构性质 9.6.1 简化的DNA分子模型 9.6.2 基于基本度量理论的双电层密度泛函 9.6.3 电解质小离子围绕聚离子DNA的分布 9.6.4 电势分布 9.7 DNA电解质溶液的有择作用系数 9.7.1 有择作用系数 9.7.2 单一电解质溶液的有择作用系数 9.7.3 混合电解质溶液的有择作用系数 9.8 DNA电解质溶液的渗透系数 9.8.1 DNA溶液的胞腔模型 9.8.2 基于胞腔模型的密度泛函理论 9.8.3 DNA溶液的渗透系数参考文献附录A 单位换算与基本常数附录B 纯物质的特性常数

章节摘录

插图：任何纯物质和混合物的热力学性质，除非其处于理想气体状态，均取决于纯物质和混合物体系内部的分子间作用力。
分子间作用力是导致非理想气体行为、溶液结构变化及相转变的主要原因。
流体内部存在两种类型的分子间作用力，即吸引力与斥力。
当分子互相远离时彼此吸引；而靠近到一定距离时，又产生斥力而彼此排斥。
显然，若无分子间吸引力，气体就不会凝结为液体；同理若无分子间斥力，液体也不会不宜压缩。
目前，人们对各种类型的分子间作用力描述已经获得了定量和半定量的结果。
但迄今为止，对分子间作用力的本质尚未认识充分，但基于分子间作用力的各种位能函数的近似模型，则构成了现代统计力学计算和计算机分子模拟的重要基础。
本章首先介绍不同类型的分子间作用力，包括静电引力、色散力、诱导力和分子间斥力。
最后介绍适宜科学与工程计算的各种类型的分子位能函数。
读者若欲深入了解此方面的内容，可参阅有关著作。

编辑推荐

《高等化工热力学》既是一本研究生教材，也是一本分子热力学专著。
作者深入浅出地阐述了统计热力学的基本原理，同时以较大篇幅详细介绍了流体状态方程，以及电解质溶液、高分子溶液和生物大分子溶液的分子热力学模型、前沿进展和工程应用。
《高等化工热力学》可作为高等院校化工类及相关专业研究生化工热力学课程的教材，也可供化学工程领域相关科技人员参考使用。

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