

图书基本信息

书名：<<材料化学工程中的热力学与分子模拟研究>>

13位ISBN编号：9787030297846

10位ISBN编号：7030297849

出版时间：2011-5

出版时间：科学出版社

作者：陆小华

页数：261

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>

## <<材料化学工程中的热力学与分子模拟>>

### 内容概要

由陆小华编著的《材料化学工程中的热力学与分子模拟研究》阐述了“材料化学工程”学科的难点、热点和焦点问题，并初步探讨了学科自身的方法论。采用热力学和分子模拟的方法研究材料化学工程典型体系，重点介绍作者对材料性能有显著影响的介观层次的微相结构及其演变过程、界面结构以及溶液中离子的传递规律的创新工作。

《材料化学工程中的热力学与分子模拟研究》可供从事化学工程、材料工程、生物工程的科技人员以及高等院校相关专业师生阅读参考。

## 作者简介

陆小华，男，1959年12月生，1988年毕业于原南京化工学院化学工程专业并获博士学位，1993年任教授。

曾任德国洪堡基金会(AvH)研究员、美国AspenTech公司访问教授。

现任南京工业大学博士生导师，教育部“材料化学工程”创新团队学术带头人和材料化学工程国家重点实验室学术委员会副主任。

兼任美国北卡罗来纳州立大学兼职教授，国际杂志Fluid

Phase Equilibria、《化工学报》、《过程工程学报》编委，江苏省第九、十、十一届人大常委会委员。

长期从事化工热力学及材料化学工程和介观与界面现象研究，曾担任2010年“第十二届国际流体相平衡会议PPEPPD”国际组委会主席，主持国家杰出青年基金项目等，共发表论文200余篇，获国家发明专利授权18项。

曾荣获原化工部有突出贡献的中青年专家称号、霍英东教育基金会青年教师奖、教育部有突出贡献的中国博士学位获得者、原化工部跨世纪人才、国务院“政府特殊津贴”，全国教育系统劳动模范和优秀教师称号，被评为江苏省师德模范，先后获国家技术发明二等奖和5次获得教育部、江苏省和原化工部科技进步、二等奖。

培养博士、硕士70余名，其中一位获全国百篇优秀博士论文。

## 书籍目录

## 前言

## 第1章 从介观尺度和界面现象分析材料化学工程所面临的挑战

- 1.1 材料化学工程的产生与意义
- 1.2 材料化学工程的主要研究内容
  - 1.2.1 “做”材料：基于化学工程理论与方法的材料制备技术
  - 1.2.2 “用”材料：基于新材料的化学单元技术与理论
  - 1.2.3 面向先进材料的材料化学工程的关键科学问题及难点
  - 1.2.4 以介孔TiO<sub>2</sub>功能材料为例剖析材料化学工程难点
- 1.3 整体学术思路和本书框架
  - 1.3.1 材料化学工程研究方法的出发点
  - 1.3.2 整体学术思路
  - 1.3.3 本书主要内容和框架

## 参考文献

## 第2章 电解质溶液的固液相平衡和分子模拟研究

- 2.1 电解质溶液的固液相平衡和分子模拟研究的重要意义
- 2.2 电解质溶液的固液相平衡研究
  - 2.2.1 电解质溶液分子热力学模型（Lu-Maurer模型）
  - 2.2.2 离子选择性电极（ISEs）实验方法
  - 2.2.3 电解质溶液相平衡软件包的建立
  - 2.2.4 固液相平衡级计算通用方法的建立
- 2.3 电解质溶液的分子模拟研究
  - 2.3.1 离子水化的分子动力学研究
  - 2.3.2 离子水化和缔合的量子化学与分子动力学研究
- 2.4 高温高压下电解质溶液的热力学模型
  - 2.4.1 高温高压下电解质溶液的分子模拟
  - 2.4.2 热力学模型的建立
  - 2.4.3 模型参数的拟合及应用

## 参考文献

## 第3章 基于热力学方法的固液界面传递行为的研究

- 3.1 固液界面传递过程中热力学研究的重要意义
  - 3.1.1 固液界面传递研究的重要性
  - 3.1.2 固液界面传递过程的热力学研究方法
  - 3.1.3 运用非平衡热力学研究传递模型的思路
- 3.2 基于非平衡热力学方法的固液界面传递模型的建立及其应用
  - 3.2.1 晶体在溶液中溶解的物理模型描述
  - 3.2.2 固液界面传递模型的建立
  - 3.2.3 晶体溶解动力学实验
- 3.3 非平衡热力学固液界面传递模型的应用
  - 3.3.1 钛酸钾晶须高质量、低成本制备过程中离子交换速率的控制
  - 3.3.2 光卤石溶解过程中的形貌控制
- 3.4 影响固液界面传递行为的因素
  - 3.4.1 材料化学工程中的界面现象
  - 3.4.2 认识复杂固液界面传递过程中遇到的难题
- 3.5 固液界面传递行为在材料化学工程研究中的新手段

## 参考文献

## <<材料化学工程中的热力学与分子模拟>>

### 第4章 界面影响下流体纳米微结构的分子模拟研究

#### 4.1 材料化学工程中的分子模拟

##### 4.1.1 化工应用中的分子模拟

##### 4.1.2 膜材料设计与优化的分子模拟

##### 4.1.3 纳米器件与生物通道的分子模拟

#### 4.2 离子水溶液的分子模拟

##### 4.2.1 水的微结构

##### 4.2.2 离子水化

#### 4.3 几何尺寸对流体性质的影响

##### 4.3.1 几何尺寸对流体分子微结构的影响

##### 4.3.2 温度、压力对流体分子微结构的影响

##### 4.3.3 几何尺寸对流体吸附与分离的影响

#### 4.4 化学改性对流体性质的影响

##### 4.4.1 化学改性对流体结构的影响

##### 4.4.2 化学改性对离子水化的影响

##### 4.4.3 表面亲疏水性对流体扩散的影响

#### 4.5 分子模拟研究对材料化学工程应用的启示

#### 参考文献

### 第5章 热力学方法在钛酸钾晶须制备及自润滑材料研究中的应用

#### 5.1 钛酸钾晶须的制备及存在的问题

##### 5.1.1 钛酸钾晶须的概述

##### 5.1.2 六钛酸钾晶须的制备方法

##### 5.1.3 高温反应—离子交换法存在的问题及研究思路

#### 5.2 六钛酸钾晶须制备过程中的热力学研究

##### 5.2.1 烧结过程的热力学研究

##### 5.2.2 基于热力学的六钛酸钾形貌控制

##### 5.2.3 离子交换热力学模型的建立

##### 5.2.4 基于离子交换热力学模型的六钛酸钾高纯度制备

#### 5.3 六钛酸钾晶须制备过程中的动力学研究

##### 5.3.1 利用离子选择性电极在线监测离子交换过程

##### 5.3.2 离子交换机理研究

##### 5.3.3 使用统计速率理论模型研究离子交换动力学模型

#### 5.4 六钛酸钾晶须的规模化制备

#### 5.5 基于非平衡热力学原理的自润滑材料关键因素分析及其设计

##### 5.5.1 基于非平衡热力学原理的自润滑材料关键因素分析

##### 5.5.2 基于非平衡热力学原理的自润滑材料设计

#### 参考文献

### 第6章 材料化学工程方法在介孔氧化钛功能材料研究中的应用

#### 6.1 氧化钛材料及其应用的研究现状

##### 6.1.1 材料化学工程方法指导氧化钛功能材料的制备

##### 6.1.2 以氧化钛材料为基础的过程装备与技术

#### 6.2 介孔氧化钛材料的制备及特性研究

##### 6.2.1 介孔氧化钛制备及其难点

##### 6.2.2 控制pH值实现介孔氧化钛纯度的精确调控

##### 6.2.3 介孔氧化钛的高比表面积研究

##### 6.2.4 介孔氧化钛的高晶化孔壁和高锐钛稳定性研究

##### 6.2.5 介孔氧化钛的原子层面晶格匹配的锐钛TiO<sub>2</sub> (B) 核壳结构研究

## <<材料化学工程中的热力学与分子模拟>>

### 6.2.6 介孔氧化钛的快速化制备

## 6.3 热力学与分子模拟指导的介孔氧化钛加氢脱硫研究

### 6.3.1 面向国家重大需求的课题设立

### 6.3.2 面向加氢脱硫应用需求的材料初步设计与制备

### 6.3.3 热力学指导的超临界CO<sub>2</sub>催化剂纳米化担载技术

### 6.3.4 热力学和分子模拟在氧化钛与流体间特殊界面性质研究中的应用

### 6.3.5 介孔氧化钛其他功能化修饰及应用展望

## 6.4 材料化学工程方法指导氧化钛光催化装备与技术的研究

### 6.4.1 非均相光催化技术及反应器的简介

### 6.4.2 高级氧化技术矿化水中污染物的理论极限浓度分析

### 6.4.3 液固非均相光催化的过程强化

### 6.4.4 液固非均相光催化过程的放大

### 6.4.5 液固非均相光催化反应装置运行的模型指导

## 参考文献

## 第7章 材料化学工程内涵及方法论初探

### 7.1 材料化学工程学科内涵的初探

### 7.2 材料化学工程方法论初探

#### 7.2.1 固液界面处介质传递的极限分析：复杂溶液的相平衡

#### 7.2.2 解决过程速率和效率的博弈：非平衡热力学的线性化

#### 7.2.3 分子层面认识在材料制备和应用层面转化：理论、模拟和实验的互动

## 参考文献

## 章节摘录

插图：第1章 从介观尺度和界面现象分析材料化学工程所面临的挑战过程工业给人们提供了丰富的物质基础，同时也带来了化石资源枯竭、能源短缺、环境污染等问题，可持续发展受到严重制约，节能减排是国家中长期科学和技术发展规划的要求，这一目标的实现需要多学科的综合研究，材料化学工程在此背景下应运而生。

作为一门新兴的交叉学科，材料化学工程强调以化学工程为基础，面向先进材料的材料制备和应用。

如何将化学工程的放大方法引入材料制备领域？

如何利用宏观易控操作条件，实现对材料结构的控制？

如何基于特定结构材料进行工艺和装备优化？

如何建立材料功能的失效与其结构的演变和工艺装备的关系？

本章将在剖析关键科学问题的基础上，介绍全书的学术思路和研究方法。

1。

1 材料化学工程的产生与意义过程工业是我国工业的重要组成部分，据统计，2001年以物质转化过程为特征的过程工业创造的工业产值为3。

7万亿元、工业增加值为1。

2万亿元、产品销售收入为4。

2万亿元，分别占整个制造业的42。

9%、42。

5%和44。

8%。

过程工业的发展对加快我国工业化进程、解决我国长期供给短缺的问题发挥了关键的作用。

但我国过程工业的技术与装备十分落后，普遍存在资源浪费、能耗高和环境污染等问题，有的行业资源利用率只有10%，过程工业的能耗占全国工业能耗总量的70%，占全国能耗总量的54。

4%，单位产值的能耗是世界平均水平的2~4倍，空气、水和固体废弃物污染严重。

我国已成为世界第一资源加工消费大国和世界第二能源耗用大国。

据全球矿产资源战略研究2001年报告指出：“中国的许多资源不足，并将在二三十年内面临包括石油和天然气在内的各种资源的短缺。

”。

过程工业对资源、能源的过度消耗和对环境的污染已经成为制约我国可持续发展的瓶颈问题。

大力降低资源消耗、提高能源利用效率、保护环境已经成为我国过程工业发展的关键所在。

据国家中长期科学和技术发展规划纲要指出：“根据全面建设小康社会的紧迫需求、世界科技发展趋势和我国国力，必须把握科技发展的战略重点”，“把发展能源、水资源、环境保护技术放在优先位置，下决心解决制约经济社会发展的重大瓶颈问题”。

因此，有效解决我国过程工业对资源、能源的过度消耗和对环境的污染等瓶颈问题，是国家中长期科学和技术发展规划的要求。

针对过程的开发及优化，郭慕孙院士[1]提出“过程工程”的概念，认为以“三传一反”为学识基础的化学工程，其应用对象已远超出了化学工程起家时的化学产品，并正在延伸到高新技术领域，其共同特征是物质的物理和化学加工工艺。

李洪钟院士指出[2]，在化学工程向过程工程扩展的过程中，往往涉及同时发生在很宽的时间和空间尺度上的现象，从分子化学键振动的纳秒( $< 10^{-9}$ s)到工业过程所需的几天的时间尺度，从分子或颗粒的纳米( $10^{-9}$ m)到工厂的米或千米( $> 10$ m)的空间尺度。

如果要控制某一尺度的现象，一般需要在另一尺度寻找可操作的手段，分子尺度到宏观过程尺度的多尺度关联势在必行。

这就对传统的“三传一反”提出了新的挑战。

为此，李静海院士[3]提出“多尺度”的概念，认为结构量化现已成为化学工程由经验科学向量化

科学过渡的关键，需要使用多尺度的方法，来描述微观、介观和宏观上的物理变化。

通过上述分析可以看出，纳米尺度下流体的微结构表现出来的各种特殊行为以及介观尺度下界面处流体的传递与材料应用时所发挥的功能密切相关，是各种复杂现象背后的机理所在，一旦弄清受限流体的行为对于材料的设计和应用都是意义非凡的。

从本质上说，对于具有大比表面积的固体材料，其界面处流体分子的数量在流体分子总数目中的比例远远大于常规材料，而当流体分子靠近界面处时就会形成一种特殊的微观结构，这种微观结构下，由于空间的限制以及流体分子与固体表面的相互作用使得界面处流体不再连续，其性质也异于体相流体的平均性质。

作者认为材料化学工程的关键科学问题有两个：纳米尺度下流体的微结构和介观尺度下界面处流体的传递。

这两点也是建立介观尺度下流体传递和反应理论的基础。

纳米尺度下的流体微结构是研究介观尺度下界面处流体传递行为的基础。

水通常被看作典型的流体。

水的微结构包含了纳米受限下的水结构、离子水化的水结构、超临界极端条件下的水结构等。

众所周知，氯化钠、氯化钙等盐类往往具有较高的熔点，需要近千度的高温才能打破离子键使其融化。

然而，这些盐类却在常温常压下的水中很容易就溶化了，是什么起到了打破离子键的作用？

研究表明离子晶体溶于水后，离子周围会被水分子包围，正是这种被称为“水化”的作用打破了离子键使得离子晶体可以稳定地溶解于水溶液中。

是不是这种“水化”作用在任何条件下都稳定存在？

若不是，那什么条件的改变可以调整这种水化作用的强弱呢？

这些条件的改变是否存在一定规律，能够建立相应的热力学函数关系呢？

通过本书第2章中关于水化与缔合的相关研究实例将告诉读者，水化的作用是可以温度调整的，而且还可以建立相应的热力学模型以便工业应用。

此外，作者的研究表明，此水化作用不仅对离子的溶解产生重要影响；同时它对水分子的结构同样存在不容忽视的作用。

受到离子的吸引，水分子不再保持其原有的结构，而是在离子周围重新排布，表现出有别于纯水的性质[4]。

。

。

另一研究表明，纳米受限下水分子的传输速率是体相中水分子传输速率的数十倍。

这就是外界的作用（离子，界面，外场）使得水自身的氢键结构被打破，水在媒介物（界面，离子等）附近形成低维的单分子层微结构，它是非连续的，起到了关联媒介物和体相水的作用，这种流体结构的变化反映在纳米尺度会对水的性质和行为产生重大的影响。

综上，纳米尺度下流体的微结构受媒介性质控制而同时又可以影响媒介物的功能。

在材料最终的性能中起到了关键的作用。

编辑推荐

《材料化学工程中的热力学与分子模拟研究》是华夏英才基金学术文库之一。

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>