

<<溶剂萃取体系定量结构-性质关系>>

图书基本信息

书名：<<溶剂萃取体系定量结构-性质关系>>

13位ISBN编号：9787502572303

10位ISBN编号：7502572309

出版时间：2005-8

出版时间：化学工业

作者：戴猷元

页数：193

字数：256000

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>

<<溶剂萃取体系定量结构-性质关系>>

内容概要

本书共10章,包括引言、分子连接性指数、分子连接性指数的拓扑信息和电子信息、分子连接性指数与有机物的水溶性、分子连接性指数与分配系数、物质pKa的QSPR研究、萃取剂表观碱度的QSPR研究、络合萃取体系的QSPR研究、QSPR研究在溶剂萃取领域的应用及溶剂萃取体系QSPR研究的新进展。

本书可作为高等院校化工、生物化工、环境、制药等专业师生的教学参考书,也可供上述专业从事分离过程研究开发、设计和运行的工程技术人员参考。

<<溶剂萃取体系定量结构-性质关系>>

书籍目录

第1章 引言 1.1 定量结构-性质关系QSAR/QSPR的研究 1.2 QSPR研究中的典型结构参数 1.3 分子连接性指数方法 1.4 QSPR研究和应用进展 参考文献第2章 分子连接性指数 2.1 概述 2.2 Randic分支指数 2.3 分子连接性指数的计算方法 2.4 分子连接性指数计算中原子点价的修正 2.5 分子连接性指数计算机算法的实现 2.6 分子连接性指数的计算实例 参考文献第3章 分子连接性指数的拓扑信息和电子信息 3.1 分子连接性指数的拓扑信息 3.2 分子连接性指数的电子信息 参考文献第4章 分子连接性指数与有机物的水溶性 4.1 溶解过程及分子间的相互作用 4.2 烷烃在水中的溶解特性lgS的关联式 4.3 烷基取代苯在水中的溶解特性lgS的关联式 4.4 脂肪醇在水中的溶解特性lgS的关联式 4.5 脂肪醚在水中的溶解特性lgS的关联式 4.6 脂肪酯在水中的溶解特性lgS的关联式 参考文献第5章 分子连接性指数与分配系数 5.1 概述 5.2 有机羧酸的疏水性常数关联式 5.3 饱和烷烃的疏水性常数关联式 5.4 醚类有机物疏水性常数关联式 5.5 醛类有机物疏水性常数关联式 5.6 酮类有机物疏水性常数关联式 5.7 酯类有机物疏水性常数关联式 5.8 醇类有机物疏水性常数关联式 5.9 胺类有机物疏水性常数关联式 5.10 芳香族有机羧酸疏水性常数关联式 5.11 酚类有机物疏水性常数关联式 5.12 疏水性常数总QSPR模型的建立 参考文献第6章 物质pKa的QSPR研究 6.1 物质的pKa 6.2 影响物质pKa的因素 6.3 芳香族衍生物pKa值的定量计算 6.4 脂肪族有机羧酸pKa的定量模型 参考文献第7章 络合萃取剂表观碱度的QSPR研究 7.1 物理萃取和化学萃取 7.2 络合萃取过程的描述 7.3 络合萃取平衡的影响因素 7.4 络合萃取剂的表观碱度pKa,B 7.5 三辛胺-稀释剂体系表观碱度pKa,B的QSPR模型 7.6 磷氧类络合剂-稀释剂体系表观碱度pKa,B的QSPR模型 参考文献第8章 络合萃取体系的QSPR研究 8.1 络合萃取相平衡 8.2 络合萃取平衡常数的QSPR模型描述 8.3 有机羧酸络合萃取体系的QSPR研究 8.4 酚类有机物络合萃取体系的QSPR研究 8.5 芳香酸络合萃取体系的QSPR研究 8.6 胺类有机物络合萃取体系的QSPR研究 参考文献第9章 QSPR研究在溶剂萃取领域的应用 9.1 概述 9.2 络合萃取平衡的两种预测模型 9.3 pH>pKa条件下实现分离的络合萃取体系设计 9.4 双组分稀溶液分离的络合萃取体系设计 参考文献第10章 溶剂萃取体系QSPR研究的新进展 10.1 络合萃取的机理分析和络合剂相对碱度pK_{a,B}的定义 10.2 以被萃溶质为对象的络合剂相对碱度pK_{a,B}(相对酸度pK_{a,A})的测定 10.3 以被萃溶质为对象的络合剂相对碱度pK_{a,B}的QSPR模型 10.4 利用络合剂相对碱度pK_{a,B}的萃取体系QSPR模型 参考文献主要符号说明

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>