

<<有机化合物的分子结构与危险特性>>

图书基本信息

书名：<<有机化合物的分子结构与危险特性>>

13位ISBN编号：9787030324856

10位ISBN编号：7030324854

出版时间：2011-10

出版时间：科学出版社

作者：蒋军成，潘勇 著

页数：283

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>

## <<有机化合物的分子结构与危险特性>>

### 内容概要

本书主要介绍著者多年来在国家自然科学基金( No.29936110、No.20976081、No.21006045 ) 的资助下,对有机物危险特性与分子结构间的定量关系研究所取得的最新成果。

全书分4个部分,第一部分概述有机化合物危险特性;第二部分阐述有机化合物分子结构参数与危险特性之间的内在相关性;第三部分阐述多元统计及优化算法在有机物危险特性构效关系研究中的应用;第四部分阐述基于组合算法的有机物危险特性构效关系研究。

《有机化合物的分子结构与危险特性》不仅提出了一批具有良好性能的理论预测模型,为工程提供了根据分子结构预测有机物各危险特性的有效方法,解决了实验数据缺乏的问题;还重点对有机物危险特性与分子结构间的构效关系进行解析,阐明了对有机物各危险特性起决定作用的结构因素及其影响规律,在分子水平上了解了物质微观结构对宏观危险特性的影响,为分子及材料设计提供理论指导。

《有机化合物的分子结构与危险特性》可供安全科学、环境科学、化学、毒理学等相关专业的科研人员 and 高等院校师生参考。

# <<有机化合物的分子结构与危险特性>>

## 书籍目录

序

前言

### 第一部分 有机化合物危险特性概论

#### 第1章 有机化合物的危险特性及其分类

1.1 化学物质的分类

1.2 危险性化学物质的分类

1.3 有机化合物的危险特性

参考文献

#### 第2章 有机化合物危险特性常用预测方法

2.1 参数关联法

2.2 基团贡献法

2.3 定量结构-性质相关性 (QSPR) 研究

参考文献

#### 第3章 定量结构-性质相关性 (QSPR) 研究概述

3.1 QSPR研究的含义

3.2 QSPR研究的发展趋势与特点

3.3 QSPR研究的相关技术

3.4 QSPR技术的发展和应用情况

参考文献

### 第二部分 有机化合物分子结构参数与危险特性相关

#### 第4章 分子连接性与危险特性相关

4.1 分子连接性指数概述

4.2 分子连接性指数的物理意义

4.3 分子连接性在QSPR研究中的应用方法学

4.4 分子连接性在有机物危险特性QSPR研究中的应用实例

4.5 分子连接性方法的应用前景

参考文献

#### 第5章 电性拓扑状态与危险特性相关

5.1 电性拓扑状态指数概述

5.2 电性拓扑状态指数的计算与划分

5.3 电性拓扑状态指数在有机物危险特性QSPR研究中的应用实例

参考文献

#### 第6章 基团贡献法预测有机物危险特性

6.1 基团贡献法

6.2 ASOG模型

6.3 UNIFAC法

6.4 其他基团贡献法

6.5 基团贡献法在有机物危险特性QSPR研究中的应用实例

参考文献

#### 第7章 量子化学在有机物危险特性QSPR研究中的应用

7.1 量子化学概述

7.2 量子化学理论及参数

7.3 量子化学参数与燃爆特性的相关性

7.4 量子化学参数与急性毒性的相关性

7.5 量子化学在有机物危险特性QSPR研究中的优缺点及其展望

## <<有机化合物的分子结构与危险特性>>

### 参考文献

#### 第三部分 多元统计及优化算法在有机物危险特性QSPR研究中的应用

##### 第8章 人工神经网络在有机物危险特性QSPR研究中的应用

###### 8.1 概述

###### 8.2 人工神经网络的构造和功能

###### 8.3 人工神经网络的分类

###### 8.4 BP型神经网络

###### 8.5 BP神经网络技术在有机物危险特性QSPR研究中的应用实例

### 参考文献

##### 第9章 遗传算法在有机物危险特性QSPR研究中的应用

###### 9.1 遗传算法概述

###### 9.2 遗传算法基本原理与算法实现

###### 9.3 遗传算法的优缺点

###### 9.4 遗传算法在QSPR研究中的应用领域

.....

#### 第四部分 基于组合算法的有机物危险特性QSPR研究

## 章节摘录

版权页：插图：1.3.1 闪点闪点是指在规定的实验条件下，可燃液体在空气中或在液面附近产生蒸气，其浓度足够被点燃时的最低温度。

可燃液体的燃烧，并非可燃液体本身，而是液体蒸发出来的气体在燃烧。

液体的蒸发要克服液体分子间存在的引力（称分子间作用力）。

一般来说，同类液体分子间力的大小与液体相对分子质量大小有关，相对分子质量大的液体比相对分子质量小的液体的蒸发要困难，只有升高温度，才会使液体中能量大的分子数目增多，克服液体表面引力的束缚，使蒸发到空气中的分子数量增加，蒸气压力提高。

分子性质由分子结构决定，分子结构不同，性质也不同。

闪点亦是如此。

相关研究表明，有机物的闪点与其分子结构间遵循一定的变化规律，以烃类同系物为例L3）：闪点随相对分子质量的增大、沸点的升高、密度的增大而升高，随饱和蒸气压的增大而降低；饱和烃（烷烃）的闪点比不饱和烃（烯烃、二烯烃、炔烃）的闪点高；同分异构体中，直链结构（正结构体）的闪点比支链结构（异结构体）的闪点高；烃与烃的衍生物之间的闪点按烃、醚、酮、醇、羧酸的顺序下降。

## <<有机化合物的分子结构与危险特性>>

### 编辑推荐

《有机化合物的分子结构与危险特性》以化学物质中的危险性物质、特别是具有燃烧、爆炸、中毒等危险性的有机化合物为中心，系统地介绍有机化合物分子结构与其危险特性间的内在定量关系，以期反映著者所在的课题组近年来在该研究领域的最新研究进展及取得的最新研究成果。

全书共分四个部分十五章。

第一部分介绍有机化合物危险特性概论；第二部分介绍有机化合物分子结构参数与危险特性相关；第三部分介绍多元统计及优化算法在有机物危险特性QSPR研究中的应用；第四部分介绍基于组合算法的有机物危险特性QSPR研究。

书中不仅针对上述各方法均提供相应的有机物危险特性的理论预测模型，还阐明了对各危险特性起决定作用的结构因素及其影响规律。

书中内容主要根据近年来国内外有关学术论文以及申请者所在课题组近期所发表的论文编著而成，着重介绍了该课题组近年来在此领域中的研究成果。

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>