

<<高分子链构象统计学>>

图书基本信息

书名：<<高分子链构象统计学>>

13位ISBN编号：9787312020216

10位ISBN编号：7312020216

出版时间：2006-12

出版时间：中国科学技术大学出版社

作者：彭建邦

页数：258

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>

<<高分子链构象统计学>>

前言

高分子与小分子的重要区别之一就是有数目巨大的构象。

自上世纪20年代Staudingerr提出高分子学说以来，高分子链构象的研究一直颇受重视。

因为聚合物分子的大小、形状决定于分子的构象，包括光、电、磁以及机械力学性能也都与分子的构象相关。

早在1930年代初，Kuhn就注意到足够长的线形柔性高分子链的构象与数学上的无规行走问题的对应关系。

他采用自由连接链模型，得到高分子链末端矢量服从高斯分布，进而又提出了排除体积效应的概念，研究了聚合物稀溶液的黏度、流动双折射。

其后Guth、Mark 分析了橡胶高弹性与构象熵的关系。

1940年代中期，Taylorl更进一步计算了高分子链有阻内旋转的分子参数，使构象统计与分子链的化学结构--键长、键角以及单键的内旋转角相联系。

1940年代末，Flory提出实际的聚合物分子链在 θ 条件下其排除体积效应将会消失，这时的分子链就是高斯链。

Flory的这一论述揭示了排除体积效应的物理本质，并使对高斯链的实验研究成为可能。

1950年代，Volkenstein提出了高分子的旋转异构态理论，使构象统计的研究进入了一个新阶段，为后来的G—矩阵(generator matrix)方法在构象统计中的应用奠定了物理基础。

这一模型使构象统计的计算大为简化和可行，而且模型可以保留真实链的特征，也可处理相邻键内旋转的相关性问题。

特别是在采用Kramers的G—矩阵技术后，复杂的计算问题迎刃而解。

Gotlib、Birshetein、Ptitsyn、lifson、Nagai以及Hoeve，首先把G—矩阵应用到聚合物分子链的旋转异构态模型，成功地处理了简单链的平均二次矩(链均方末端距)。

其后Flory等人口基于聚合物分子链的旋转异构态模型把G—矩阵应用到包括共聚物在内的各种真实的链状分子，计算了链的二次和高次矩，回转半径以及与构象相关的物理量。

<<高分子链构象统计学>>

内容概要

本书对聚合物链状分子的构象统计学的基本内容作了较深入的介绍，求得在物理上能给出清楚的图像和明确的解释，在数学上能对结果的由来给出详细的交代。

全书共分12章。

第1章主要介绍聚合物分子链构象的概念及构象的统计意义。

第2章到第4章是几种简单的模型链及其处理方法。

第5章到第9章介绍旋转异构态理论及其应用。

第10章讨论实际链的远程相互作用——排除体积效应问题。

第11章简单介绍。

Monte Carlo。

方法在链状分子构象统计中的应用。

最后一章以光散射为主介绍聚合物分子形态的测定方法。

各章都列出了参考文献，从第2章起也附上了一些习题，其中有的可看成是对正文的补充。

本书可作为高分子化学和物理专业的研究生教材，也可供相关相关科研人员参考。

<<高分子链构象统计学>>

书籍目录

序言 参考文献第1章 引言 1.1 分子的构型和构象 1.2 构象体相互转化的频率和平衡常数 参考文献第2章 自由连接链 2.1 无规行走问题——高斯分布 2.2 高斯链的几何特征 2.3 正确分布——马尔可夫法 2.4 有限长度的自由连接链—— L^* 分布 2.5 结果的比较 2.6 矢量法求自由连接分子链的均方末端距 2.7 链的均方回转半径 习题 参考文献第3章 非自由连接的几何链 3.1 模型及键坐标 3.2 坐标变换矩阵及链均方末端距的初步计算 3.3 键坐标变换矩阵的对角化和分子链均方末端距的精确计算 3.4 特征比 习题 参考文献第4章 蠕虫状链 4.1 持久长度和链的均方末端距 4.2 特征比 4.3 Porod-Kratky链的均方回转半径 4.4 持久长度的估计 习题 参考文献第5章 旋转异构态理论和构象配分函数 5.1 旋转异构态理论 5.2 单个高分子链的构象配分函数 习题 参考文献第6章 平均键构象 6.1 两种情况下链的平均键构象 6.2 键和键对占有某种状态平均几率的估算 6.3 条件几率 习题 参考文献第7章 G-矩阵法求单个链的无扰尺寸 7.1 链的末端距、其平方以及回转半径平方的G-矩阵表述第8章 实际链的几个例子第9章 与链构象有关的其他性质的G-矩阵表述第10章 实际链的大小和排除体积效应第11章 链构象的Monte Carlo方法简介第12章 测定聚合物分子形态的光散射方法附录基本符号规定人名索引名词索引

<<高分子链构象统计学>>

章节摘录

插图：

<<高分子链构象统计学>>

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>