

《计算化学》

图书基本信息

书名：《计算化学》

13位ISBN编号：9787040193633

10位ISBN编号：7040193639

出版时间：2008年06月

出版社：高等教育出版社

作者：张常群,鄢红,郭广生,吕志

页数：561 页

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu111.com

前言

随着现代科技的飞速发展，计算机已经普遍应用于化学学科的各个研究领域，如采集数据、数学运算、控制实验、储存和提取信息以及检索等等。计算机与基础教育相结合已成为当今世界新技术和教育改革的特征和趋势。一个成熟的化学工作者，以及与学科发展相适应的大学教育，不仅要与这一发展趋势相适应，更应当走在学科发展的前沿，才能培养出更加优秀的专业人才。“计算化学”正是在这样的学科大发展的背景下应运而生的。“计算化学”是化学、计算方法、统计学和程序设计等多学科知识融合的一门综合性新课程。它运用数学、统计学与计算机程序设计的方法，进行化学、化工的理论计算、试验设计、数据与信息处理、分类、分析和预测。作为一门新兴的、多学科（化学学科、数学学科、计算机科学、化工类相关学科）交叉的边缘学科，“计算化学”已在我校进行了五届教学实践。对其教学体系的研究不仅是“北京化工大学新世纪教改重点项目”，也是“世行贷款21世纪初高等教育教学改革项目——系列化的教学手段研究与建设”的子项目之一。《计算化学》教材的编写相继被批准为“北京市高等教育精品教材建设立项”、“普通高等教育‘十五’国家级规划教材立项”及高等教育出版社“高等教育百门精品课程教材建设（选题立项）”项目。编者从20世纪80年代中期开始从事“计算化学”相关的研究工作，本书以长期的工作积累为基础，针对学科的特点，结合本校《计算化学》教材内容编写而成，分为上、下篇。上篇以化学化工中常用的数值计算方法及计算机在化学中的应用为主线，内容包括：第一章介绍二分法、牛顿-拉弗森迭代法求解一元 N 次（ $N>2$ ）非线性方程，高斯消去法、高斯-赛德尔迭代法解线性方程组及其在化学中的应用；第二章介绍了线性插值、拉格朗日插值多项式、一元、多元线性回归、多项式拟合及数值微分在化学实验数据的拟合及模型参数确定中的应用；第三章介绍了数值积分的梯形法、辛普森法、离散点数据的求积法和求解常微分方程与一阶常微分方程组的欧拉法、龙格-库塔法及其在化学中的应用；第四章介绍了行列式求值法、雅可比方法求矩阵的本征值和本征向量，并简要介绍了其在量子化学中的应用。

内容概要

《计算化学》是“世行贷款21世纪初高等教育教学改革项目——系列化的教学手段研究与建设”子项目的研究成果，是普通高等教育“十五”国家级规划教材，北京市高等教育精品教材，高等教育出版社“高等教育百门精品课程教材(选题立项)”之一。“计算化学”是化学、计算方法、统计学和程序设计等多学科知识融合的一门综合性新课程。它运用数学、统计学与计算机程序设计的方法，进行化学、化工的理论计算、试验设计、数据与信息处理、分类、分析和预测。

全书将化学问题与数学建模、数值计算方法的选择和程序设计融为一体，内容分为上、下篇。上篇以化学化工中常用的数值计算方法及计算机在化学中的应用为主线，内容包括：代数方程及代数方程组的求解、实验数据的处理及模型参数的确定、数值积分与常微分方程的数值解法、本征值和本征向量、化学化工中的常用软件及网络资源简介、化学化工中的最优化方法及化学化工过程计算机模拟简介。下篇以化学的二级学科分类为主线，分别介绍了计算机在化学二级学科中的应用实例。

《计算化学》由文字版和光盘版组成。适用于化学类、化学工程与工艺、制药工程、高分子材料、冶金工程、无机非金属材料、环境工程等专业本科学士生作为教材使用。也可作为对计算化学有兴趣的化学、化工等专业技术人员和青年教师的参考书。

目录

绪论

0.1 什么是计算化学

0.2 计算机在化学中的应用及其发展

0.3 计算化学的研究内容和方法

上篇：化学中常用的数值计算方法

第一章 代数方程及代数方程组的求解

1.1 一元 N 次($N>2$)非线性方程的求解

1.1.1 二分法

1.1.1.1 方法原理

1.1.1.2 程序框图及源程序

1.1.1.3 应用示例

1.1.2 牛顿-拉弗森迭代法

1.1.2.1 方法原理

1.1.2.2 程序框图及源程序

1.1.2.3 应用示例

1.2 解线性方程组的方法

1.2.1 选主元的高斯消去法

1.2.1.1 方法原理

1.2.1.2 程序框图及源程序

1.2.1.3 应用示例

1.2.2 高斯-赛德尔迭代法

1.2.2.1 方法原理

1.2.2.2 程序框图及源程序

1.2.2.3 应用示例

习题

第二章 实验数据的处理及模型参数的确定

2.1 插值法

2.1.1 线性插值

2.1.1.1 方法原理

2.1.1.2 程序框图及源程序

2.1.1.3 应用示例

2.1.2 拉格朗日插值多项式

2.1.2.1 一元拉格朗日插值

2.1.2.2 一元三点拉格朗日插值

2.2 回归分析和曲线拟合

2.2.1 一元线性回归分析

2.2.1.1 方法原理

2.2.1.2 程序框图及源程序

2.2.1.3 线性模型的推广

2.2.1.4 应用示例

2.2.2 多元线性回归

2.2.2.1 方法原理

2.2.2.2 可化为多元回归的问题

2.2.2.3 程序框图及源程序

2.2.2.4 应用示例

2.2.3 多项式拟合简介

2.2.3.1 方法原理

2.2.3.2 源程序

2.2.3.3 应用示例

2.3 数值微分

2.3.1 方法原理

2.3.2 程序框图及源程序

2.3.3 应用示例

习题

第三章 数值积分与常微分方程的数值解法

3.1 数值积分

3.1.1 梯形法原理简介

3.1.2 辛普森法

3.1.2.1 方法原理

3.1.2.2 程序框图及源程序

3.1.2.3 应用示例

3.1.3 离散点数据的求积

3.1.3.1 方法原理

3.1.3.2 程序框图及源程序

3.1.3.3 应用示例

3.2 常微分方程的数值解法

3.2.1 欧拉法及其改进

3.2.1.1 方法原理

3.2.1.2 程序框图及源程序

3.2.1.3 应用示例

3.2.2 龙格-库塔法解常微分方程及一阶常微分方程组

3.2.2.1 方法原理

3.2.2.2 程序框图及源程序

3.2.2.3 应用示例

习题

第四章 本征值和本征向量

4.1 本征值和本征向量的数值解法

4.1.1 行列式求值法

4.1.2 求实对称矩阵本征值问题的雅可比方法

4.1.2.1 方法原理

4.1.2.2 源程序

4.2 应用示例

4.2.1 休克尔分子轨道理论(HMO)

4.2.2 质子NMR谱的模拟

习题

第五章 化学化工中的常用软件和网络资源

5.1 化学中常用的软件简介

5.1.1 化学结构式与分子图形编辑软件

5.1.1.1 ChemWindow软件使用简介

5.1.1.2 CS ChemOffice软件使用简介

5.1.2 数据处理软件

5.1.2.1 Origin 7.0版本的特点

5.1.2.2 Origin 7.0工作环境

5.1.2.3 Origin 7.0应用实例

5.1.3 文献管理软件

5.1.4 图谱解析软件

5.1.5 计算机辅助教学软件

5.1.6 量子化学计算软件

5.1.7 分子模拟计算软件

5.2 Internet网络上的化学化工资源

5.2.1 Internet概述

5.2.2 Internet资源指南

5.2.3 化学化工文献联机检索

5.2.4 网上的图书、期刊、研究报告

5.2.5 网上专利、技术标准

5.2.6 网上数据库

5.2.7 其他

习题

第六章 最优化方法在化学化工中的应用简介

6.1 最优化方法基本原理

6.1.1 最优化与化学的关系

6.1.2 多元函数的一维寻查方法

6.2 单纯形法及其在化学中的应用

6.2.1 方法原理

6.2.2 应用示例

6.2.2.1 钒点滴试验最佳条件的搜索

6.2.2.2 石油裂解的最佳产值条件的优化

6.2.2.3 色谱分离的顺序优化

6.3 化工调优操作及其应用

6.3.1 调优操作

6.3.2 统计调优法

6.3.2.1 方法步骤

6.3.2.2 应用示例

6.3.3 模拟调优法

6.3.3.1 方法步骤

6.3.3.2 应用示例

习题

第七章 化学化工过程计算机模拟简介

7.1 化学中计算机模拟方法简介

7.1.1 蒙特卡罗方法简介

7.1.1.1 基本原理

- 7.1.1.2 应用示例
- 7.1.2 分子动力学模拟方法简介
- 7.2 化工过程模拟简介
 - 7.2.1 化王流程稳态模拟
 - 7.2.2 化王流程动态模拟
- 7.3 化学过程计算机模拟应用实例
 - 7.3.1 二组元理想液态混合物气-液相平衡相图的计算机模拟
 - 7.3.1.1 计算原理
 - 7.3.1.2 计算实例
 - 7.3.2 二组元非理想液态混合物气-液相平衡相图的计算机模拟
 - 7.3.2.1 二组元非理想液态混合物各组分活度系数的计算
 - 7.3.2.2 具有较大偏差的二元系统恒沸状态的判据及其参数计算
 - 7.3.3 复杂反应动力学的计算及过程的计算机模拟
 - 7.3.3.1 平行反应动力学的计算机模拟
 - 7.3.3.2 连续反应动力学的计算机模拟
 - 7.3.3.3 对峙放热反应的最适宜温度的计算
 - 7.3.4 气相色谱仪及其实验过程的仿真
 - 7.3.4.1 计算模型
 - 7.3.4.2 仿真流程和程序框图
 - 7.3.4.3 计算实例和结果分析
- 习题
- 第八章 无机化学计算实例
 - 8.1 溶液浓度的计算
 - 8.2 由元素分析而得的所有经验式推导
 - 8.3 由元素分析而得的合理经验式推导
 - 8.4 二元化合物的经验式的推导
 - 8.5 无机定性分析步骤的模拟
 - 8.6 稀溶液依数性的计算
 - 8.7 用元素分析法确定有机混合物的组成
- 第九章 分析化学计算实例
 - 9.1 滴定曲线分析
 - 9.2 氧化还原滴定曲线的计算
 - 9.3 弱酸及其相应共轭碱钠盐的水溶液平衡
 - 9.4 质谱法测定混合物系统中各组分的含量
 - 9.5 ABC分子体系NMR图谱的模拟
- 第十章 有机化学计算实例
 - 10.1 关于有机合成路线的探索
 - 10.2 寻找最佳有机合成路线
 - 10.3 有机物质精馏的计算
 - 10.4 硝酸铀酰和硝酸在水相和TBP-煤油间的分配平衡的计算
- 第十一章 物理化学计算实例
 - 11.1 范德瓦耳斯状态方程计算实际气体摩尔体积
 - 11.2 纯气体逸度的计算
 - 11.3 基尔霍夫定律的应用——指定温度下化学反应焓的计算
 - 11.4 燃烧焓测定的实验数据处理
 - 11.5 物质绝热燃烧反应最高火焰温度的计算
 - 11.6 物质标准熵(量热熵)的计算
 - 11.7 多组元系统中某组元偏摩尔体积的计算
 - 11.8 单原子和双原子光谱熵的计算

- 11.9 物质标准摩尔自由能函数和焓函数的计算
- 11.10 纯物质两相平衡时克拉贝龙-克劳修斯方程式的应用
- 11.11 二组元气-液平衡实验数据的拟合与相图模拟
- 11.12 二元理想液态混合物泡点温度的计算
- 11.13 求化学平衡与相平衡体系中的独立组分数和独立方程
- 11.14 化学反应平衡常数计算
- 11.15 微分法确定化学反应的动力学方程式
- 11.16 积分法确定化学反应的动力学方程式
- 11.17 半衰期法确定化学反应的动力学方程式
- 11.18 多相催化反应动力学参数的确定
- 11.19 苯的热裂解脱氢反应的动力学
- 11.20 一级反应的蒙特卡罗法模拟
- 11.21 强电解质溶液无限稀释摩尔电导率的计算
- 11.22 强电解质水溶液离子平均活度系数的计算
- 11.23 原电池热力学计算
- 11.24 固体对气体的等温吸附方程计算
- 11.25 固体对气体的等温吸附方程及催化剂比表面积的计算
- 11.26 最优化方法确定等温吸附方程式中的参数

第十二章 结构化学计算实例

- 12.1 电子云空间分布的描绘
- 12.2 类氢原子轨道径向分布函数曲线的模拟
- 12.3 分子结构-性能的多元线性回归分析
- 12.4 一维有限势箱中粒子的能级和波函数计算

附录

- 附录1 常用的计算化学期刊、文献及网址
 - 附录2 算法和计算机语言简介
 - 附录3 数值计算误差简介
 - 附录4 构造算法与编程中应注意的几个问题
 - 附录5 算例索引
 - 附录6 子程序索引
 - 附录7 部分源程序(Object Pascal)
- 参考文献

书籍目录

绪论0.1 什么是计算化学0.2 计算机在化学中的应用及其发展0.3 计算化学的研究内容和方法上篇：化学中常用的数值计算方法第一章 代数方程及代数方程组的求解1.1 一元N次(N>2)非线性方程的求解1.1.1 二分法1.1.1.1 方法原理1.1.1.2 程序框图及源程序1.1.1.3 应用示例1.1.2 牛顿-拉弗森迭代法1.1.2.1 方法原理1.1.2.2 程序框图及源程序1.1.2.3 应用示例1.2 解线性方程组的方法1.2.1 选主元的高斯消去法1.2.1.1 方法原理1.2.1.2 程序框图及源程序1.2.1.3 应用示例1.2.2 高斯-赛德尔迭代法1.2.2.1 方法原理1.2.2.2 程序框图及源程序1.2.2.3 应用示例习题第二章 实验数据的处理及模型参数的确定2.1 插值法2.1.1 线性插值2.1.1.1 方法原理2.1.1.2 程序框图及源程序2.1.1.3 应用示例2.1.2 拉格朗日插值多项式2.1.2.1 一元拉格朗日插值2.1.2.2 一元三点拉格朗日插值2.2 回归分析和曲线拟合2.2.1 一元线性回归分析2.2.1.1 方法原理2.2.1.2 程序框图及源程序2.2.1.3 线性模型的推广2.2.1.4 应用示例2.2.2 多元线性回归2.2.2.1 方法原理2.2.2.2 可化为多元回归的问题2.2.2.3 程序框图及源程序2.2.2.4 应用示例2.2.3 多项式拟合简介2.2.3.1 方法原理2.2.3.2 源程序2.2.3.3 应用示例2.3 数值微分2.3.1 方法原理2.3.2 程序框图及源程序2.3.3 应用示例习题第三章 数值积分与常微分方程的数值解法3.1 数值积分3.1.1 梯形法原理简介3.1.2 辛普森法3.1.2.1 方法原理3.1.2.2 程序框图及源程序3.1.2.3 应用示例3.1.3 离散点数据的求积3.1.3.1 方法原理3.1.3.2 程序框图及源程序3.1.3.3 应用示例3.2 常微分方程的数值解法3.2.1 欧拉法及其改进3.2.1.1 方法原理3.2.1.2 程序框图及源程序3.2.1.3 应用示例3.2.2 龙格-库塔法解常微分方程及一阶常微分方程组3.2.2.1 方法原理3.2.2.2 程序框图及源程序3.2.2.3 应用示例习题第四章 本征值和本征向量4.1 本征值和本征向量的数值解法4.1.1 行列式求值法4.1.2 求实对称矩阵本征值问题的雅可比方法4.1.2.1 方法原理4.1.2.2 源程序4.2 应用示例4.2.1 休克尔分子轨道理论(HMO)4.2.2 质子NMR谱的模拟习题第五章 化学化工中的常用软件和网络资源5.1 化学中常用的软件简介5.1.1 化学结构式与分子图形编辑软件5.1.1.1 ChemWindow软件使用简介5.1.1.2 CS ChemC)ffice软件使用简介5.1.2 数据处理软件5.1.2.1 Origin 7.0版本的特点5.1.2.2 Origin 7.0工作环境5.1.2.3 Origin 7.0应用实例5.1.3 文献管理软件5.1.4 图谱解析软件5.1.5 计算机辅助教学软件5.1.6 量子化学计算软件5.1.7 分子模拟计算软件5.2 Internet网络上的化学化工资源5.2.1 Internet概述5.2.2 Internet资源指南5.2.3 化学化王文献联机检索5.2.4 网上的图书、期刊、研究报告5.2.5 网上专利、技术标准5.2.6 网上数据库5.2.7 其他习题第六章 最优化方法在化学化工中的应用简介6.1 最优化方法基本原理6.1.1 最优化与化学的关系6.1.2 多元函数的一维寻查方法6.2 单纯形法及其在化学中的应用6.2.1 方法原理6.2.2 应用示例6.2.2.1 钒点滴试验最佳条件的搜索6.2.2.2 石油裂解的最佳产值条件的优化6.2.2.3 色谱分离的顺序优化6.3 化工调优操作及其应用6.3.1 调优操作6.3.2 统计调优法6.3.2.1 方法步骤6.3.2.2 应用示例6.3.3 模拟调优法6.3.3.1 方法步骤6.3.3.2 应用示例习题第七章 化学化工过程计算机模拟简介7.1 化学中计算机模拟方法简介7.1.1 蒙特卡罗方法简介7.1.1.1 基本原理7.1.1.2 应用示例7.1.2 分子动力学模拟方法简介7.2 化工过程模拟简介7.2.1 化王流程稳态模拟7.2.2 化王流程动态模拟7.3 化学过程计算机模拟应用实例7.3.1 二组元理想液态混合物气-液相平衡相图的计算机模拟7.3.1.1 计算原理7.3.1.2 计算实例7.3.2 二组元非理想液态混合物气-液相平衡相图的计算机模拟7.3.2.1 二组元非理想液态混合物各组元活度系数的计算7.3.2.2 具有较大偏差的二元系统恒沸状态的判据及其参数计算7.3.3 复杂反应动力学的计算及过程的计算机模拟7.3.3.1 平行反应动力学的计算机模拟7.3.3.2 连续反应动力学的计算机模拟7.3.3.3 对峙放热反应的最适宜温度的计算7.3.4 气相色谱仪及其实验过程的仿真7.3.4.1 计算模型7.3.4.2 仿真流程和程序框图7.3.4.3 计算实例和结果分析习题第八章 无机化学计算实例8.1 溶液浓度的计算8.2 由元素分析而得的所有经验式推导8.3 由元素分析而得的合理经验式推导8.4 二元化合物的经验式的推导8.5 无机定性分析步骤的模拟8.6 稀溶液依数性的计算8.7 用元素分析法确定有机混合物的组成第九章 分析化学计算实例9.1 滴定曲线分析9.2 氧化还原滴定曲线的计算9.3 弱酸及其相应共轭碱钠盐的水溶液平衡9.4 质谱法测定混合物系统中各组分的含量9.5 ABC分子体系NMR图谱的模拟第十章 有机化学计算实例10.1 关于有机合成路线的探索10.2 寻找最佳有机合成路线10.3 有机物质精馏的计算10.4 硝酸铀酰和硝酸在水相和TBP-煤油间的分配平衡的计算第十一章 物理化学计算实例11.1 范德瓦耳斯状态方程计算实际气体摩尔体积11.2 纯气体逸度的计算11.3 基尔霍夫定律的应用——指定温度下化学反应焓的计算11.4 燃烧焓测定的实验数据处理11.5 物质绝热燃烧反应最高火焰温度的计算11.6 物质标准焓(量热焓)的计算11.7 多组元系统中某组元偏摩尔体积的计算11.8 单原子和双原子光谱熵的计算11.9 物质标准摩尔自由能函数和焓函数的计算11.10 纯物质两相平衡时克拉贝龙-克劳修斯方程式的应用11.11 二组元气-液平衡实验数据的拟合与相图模拟11.12 二元理想液态混合物泡点温度的计算11.13 求化学平衡与相平衡体系中的独

《计算化学》

立组分数和独立方程11.14 化学反应平衡常数计算11.15 微分法确定化学反应的动力学方程式11.16 积分法确定化学反应的动力学方程式11.17 半衰期法确定化学反应的动力学方程式11.18 多相催化反应动力学参数的确定11.19 苯的热裂解脱氢反应的动力学11.20 一级反应的蒙特卡罗法模拟11.21 强电解质溶液无限稀释摩尔电导率的计算11.22 强电解质水溶液离子平均活度系数的计算11.23 原电池热力学计算11.24 固体对气体的等温吸附方程计算11.25 固体对气体的等温吸附方程及催化剂比表面积的计算11.26 最优化方法确定等温吸附方程式中的参数第十二章 结构化学计算实例12.1 电子云空间分布的描绘12.2 类氢原子轨道径向分布函数曲线的模拟12.3 分子结构-性能的多元线性回归分析12.4 一维有限势箱中粒子的能级和波函数计算附录附录1 常用的计算化学期刊、文献及网址附录2 算法和计算机语言简介附录3 数值计算误差简介附录4 构造算法与编程中应注意的几个问题附录5 算例索引附录6 子程序索引附录7 部分源程序(Object Pascal)参考文献

章节摘录

插图：随着化工设备和工艺对自动化的要求越来越高，而且许多化工过程，人工进行控制相当困难，需要可靠的控制技术系统。因此计算机应用于大型工艺调和的中央控制系统。计算机模拟技术从根本上改变了化学实验技术。计算机与化学结合是化学发展的必然趋势，它为化学学科的发展、实验测试技术以及数据处理等开辟了一个崭新的方向。与“计算化学”同时发展的，同样是化学、数学、计算机科学交叉的新兴的化学学科分支的，还有“计算机化学（computer chemistry）”、“化学计量学（chemometrics）”和“化学信息学（chemicalinformatics）”。对比这四门交叉学科，“计算化学”更偏重于计算方面，它是以数值计算为基础的。“计算机化学”是用计算机研究化学反应和物质变化规律，实现化学知识创新的科学。以计算机及其网络系统为工具，建立由化学化工信息发现新知识和实现知识传播的理论和方法，认识物质、改造物质、创造新物质和认识反应、控制反应过程和创造新反应、新过程是计算机化学研究的主体。化学数据挖掘和知识发现、计算机辅助结构解析、分子设计和合成路线设计等是当前计算机化学的主要研究方向。“化学计量学”是运用数学、统计学、计算机科学以及其他相关学科的理论和方法，优化化学量测过程，并从化学量测数据中最大限度地提取有用的化学信息，它以化学量测为基点，实质上是化学量测的基础理论与方法。“化学信息学”的研究的基础内容主要包括：化学、化工文献学；化学知识体系的计算机表示、管理与网络传输；化学图形学；化学知识的计算机推演；化学教育与教学的现代技术与远程信息资源。目前，计算机在化学中的应用，涵盖了以上四门学科分支所研究的主要内容。归纳起来主要分为两个方面：数值计算方面和非数值计算方面。1.数值计算：用高级语言及其编程技术，解决化学中的数值计算问题。它是将数学的计算方法具体地应用于化学过程中，通常是研究化学中一些常用的、共同的、较为常用的计算方法，是计算化学的核心。比如实验数据的内插，函数拟合，线性方程组求解，高阶方程组求解，解微分方程组，求本征值与本征向量等，它们均与化学中量子化学、分析化学、化学平衡、化学动力学及实验数据处理等密切相关。2.非数值计算：包括（1）字符处理；（2）化学文献的存储与检索；（3）化学数据库：如元素、化合物的结构和物理化学性质，有机分析试剂的结构、合成路线和分析性质，物质的各种仪器分析方法的谱图、晶体结构数据库，以及各学科试题等大型数据库的建立及检索等；

编辑推荐

《计算化学》是由高等教育出版社出版的。

精彩短评

1、他的语言 不是visual basic 不过还可以 参考参考

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:www.tushu111.com