

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 图书基本信息

书名：<<计算机在材料和化学中的应用>>

13位ISBN编号：9787122139917

10位ISBN编号：7122139913

出版时间：2012-7

出版时间：化学工业出版社

作者：张发爱，赵斌 编著

页数：178

字数：284000

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>

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 内容概要

张发爱、赵斌编著的《计算机在材料和化学中的应用》是为材料和化学类专业学生进行初步科学研究、了解计算机在该领域中的应用而编写的。

本书共分为6章，分别介绍了计算机在材料科学中的应用、化学中常见的计算机软件和资源、化学制图软件及分子式结构绘图ChemWindow软件、科学绘图和数据分析Origin软件、分子模拟软件MP以及文献管理软件EndNote

X2的安装、使用方法和应用技巧等内容。

所选软件均为最新的版本，采用图文并茂的方式进行分层次介绍，对于初学的读者非常实用，可按照书中的实例进行操作，同时在部分章节中增加了练习，以使读者通过这些练习尽快掌握软件的应用技能。

《计算机在材料和化学中的应用》适用于材料、化学类专业的高校师生及相关领域的科技工作者参考，也适用于环境、能源等与化学分子式结构绘图、数据分析处理以及撰写科技论文的相关人员参考。

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 书籍目录

#### 第1章 计算机系统及其在材料科学中的应用

- 1.1 计算机信息系统
- 1.2 计算机辅助系统
  - 1.2.1 计算机辅助设计
  - 1.2.2 计算机辅助制造
  - 1.2.3 计算机辅助工艺规划
- 1.3 计算机控制系统
- 1.4 计算机仿真(模拟)技术
  - 1.4.1 计算机模拟技术的优势
  - 1.4.2 材料模拟方法与模拟层次
  - 1.4.3 材料研究的主要模拟技术
  - 1.4.4 计算机模拟在材料科学中的应用
  - 1.4.5 计算机模拟在分子材料科学中的应用
- 1.5 计算机数据和图像处理技术
- 1.6 计算机模拟的步骤
- 1.7 结束语
- 参考文献

#### 第2章 化学中的常用计算机软件与资源

- 2.1 化学结构式
- 2.2 三维结构
- 2.3 数据处理
- 2.4 文献管理
- 2.5 图谱解析
- 2.6 计算机辅助教学
- 2.7 量子化学计算
- 参考文献

#### 第3章 化学制图软件及化学之窗ChemWindow

- 3.1 常见的化学制图软件
  - 3.1.1 ChemSketch
  - 3.1.2 ISIS/Draw
  - 3.1.3 Chemistry 4D Draw
  - 3.1.4 GlassyChemistry
  - 3.1.5 ChemOffice 2010
  - 3.1.6 ChemDraw
  - 3.1.7 ChemWindow
- 3.2 ChemWindow 6.0的主要功能和特点
- 3.3 ChemWindow的安装
- 3.4 ChemWindow 的使用方法
  - 3.4.1 ChemWindow 6.0的程序界面
  - 3.4.2 画图和编辑基础
  - 3.4.3 结构编辑命令
  - 3.4.4 画图样式
  - 3.4.5 化学命令和工具
  - 3.4.6 标题和类型样式
  - 3.4.7 制作和使用模板

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

- 3.4.8 图库
- 3.4.9 文件与OLE 2.0的兼容性
- 3.4.10 注解工具
- 3.4.11 创建图表
- 3.4.12 分子量工具
- 3.5 ChemWindow应用示例
  - 3.5.1 绘制分子结构
  - 3.5.2 绘制化学反应式
  - 3.5.3 绘制电子转移箭头符号
  - 3.5.4 绘制图形和文字混合图
- 3.6 使用Chem3D绘制三维结构图
  - 3.6.1 Chem3D简介
  - 3.6.2 建立Chem3D模型
  - 3.6.3 整理结构与简单优化
  - 3.6.4 显示3D模型信息
  - 3.6.5 改变元素序号与替换元素
- 3.7 ChemWindow练习
- 参考文献
- 第4章 科学绘图及数据分析软件Origin
  - 4.1 Origin基础知识
    - 4.1.1 工作环境综述
    - 4.1.2 菜单栏
    - 4.1.3 工具栏
  - 4.2 工作表的使用及数据分析
    - 4.2.1 输入、编辑和保存工作表
    - 4.2.2 调整工作表的基本操作
    - 4.2.3 数据分析
  - 4.3 数据绘图
    - 4.3.1 简单二维图形绘制
    - 4.3.2 选择数据范围作图
    - 4.3.3 屏蔽曲线中的数据点
    - 4.3.4 定制图形
    - 4.3.5 绘制多层图形
  - 4.4 曲线拟合
    - 4.4.1 使用菜单命令拟合
    - 4.4.2 使用拟合工具拟合
    - 4.4.3 非线性最小二乘拟合
  - 4.5 Origin的应用
    - 4.5.1 数据的算术运算
    - 4.5.2 插值
    - 4.5.3 微分
    - 4.5.4 积分
    - 4.5.5 基线工具
    - 4.5.6 绘制红外光谱图
    - 4.5.7 多条曲线叠加对比图
    - 4.5.8 双坐标图
  - 4.6 Origin练习

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 参考文献

#### 第5章 分子模拟软件

##### 5.1 概述

##### 5.1.1 分子模拟

##### 5.1.2 分子模拟方法

##### 5.1.3 计算机实验

##### 5.1.4 分子模拟的发展

#### 5.2 常见的分子模拟软件

##### 5.2.1 Alchemy 2000

##### 5.2.2 MolSuite 2000

##### 5.2.3 ChemSite

##### 5.2.4 ChemSite Pro

##### 5.2.5 Molecular Modeling Pro

##### 5.2.6 Chem3D Ultra

##### 5.2.7 Molecular Properties

#### 5.3 MP软件的功能

##### 5.3.1 主窗口

##### 5.3.2 图形窗口

##### 5.3.3 按钮窗口

##### 5.3.4 菜单窗口

#### 5.4 文件与分子结构

##### 5.4.1 存取分子结构文件

##### 5.4.2 结构显示功能

##### 5.4.3 构造一个分子

##### 5.4.4 构造一个多分子体系

##### 5.4.5 删除部分分子片段

#### 5.5 分子模拟应用实验

##### 5.5.1

用“分子的性质”软件构建全同立构聚丙烯分子、聚乙烯分子并计算它们末端的直线距离

##### 5.5.2 用“分子的性质”软件计算聚丙烯酸甲酯的构象能量

### 参考文献

#### 第6章 文献管理软件EndNote X2

##### 6.1 概述

##### 6.1.1 文献管理软件

##### 6.1.2 EndNote软件的特点

##### 6.1.3 EndNote软件的基本功能

##### 6.1.4 EndNote软件中用到的几个术语

##### 6.1.5 EndNote X2软件的新功能

##### 6.1.6 EndNote X2软件的安装和运行环境

#### 6.2 数据库的建立

##### 6.2.1 EndNote程序主界面

##### 6.2.2 手动输入记录建立数据库

##### 6.2.3 利用在线文献搜索方法建立数据库

##### 6.2.4 利用数据库网站建立数据库

#### 6.3 数据库的管理

##### 6.3.1 程序界面

##### 6.3.2 程序菜单

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 6.4 数据库的应用

#### 6.4.1 Word中的应用

#### 6.4.2 利用数据库来撰写论文

#### 6.4.3 修改输出样式

#### 6.4.4 利用论文模板撰写论文

#### 6.4.5 EndNote统计分析功能

#### 6.4.6 笔记的管理

#### 参考文献

## <<计算机在材料和化学中的应用>>

### 编辑推荐

《计算机在材料和化学中的应用》适用于材料、化学类专业的高校师生及相关领域的科技工作者参考，也适用于环境、能源等与化学分子式结构绘图、数据分析处理以及撰写科技论文的相关人员参考。

<<计算机在材料和化学中的应用>>

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>