

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

图书基本信息

书名：<<化学图文设计与分子模拟计算>>

13位ISBN编号：9787562328544

10位ISBN编号：7562328544

出版时间：2009-3

出版时间：华南理工大学出版社

作者：刘江燕，武书彬 编著

页数：347

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>

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

前言

近十年来,计算机技术在化学化工领域得到了广泛的应用,计算(机)化学的发展呈现出蓬勃发展的喜人前景。

近年来出版了不少计算机化学方面的教材和参考书,但大多侧重于与数学密切相关的数值计算方法的介绍。

计算机图形接口技术的广泛应用,使得化学结构与图文处理变得如此方便,尤其是大型桌面化学办公系统软件ChemOffice版本的不断更新与升级,量化模拟计算软件功能的不断完善,使得我们可以在计算机上轻松地完成许多以往在实验室才能完成或要通过大量编程才能完成的工作。

化学及相关专业学生的计算机应用能力的培养是多方面的,熟悉并掌握一些常用化学软件的使用,是其计算机应用能力的一个重要方面,是进行毕业设计与撰写毕业论文的重要基础。

此外,计算机化学模拟是近年来化学、生物及材料研究中十分活跃的领域,未来的化学研究很大程度上需要理论计算的辅助支撑,熟悉并掌握化学模拟计算的一般方法,对于化学工作者来说,也是一种十分必要的知识储备。

本书是为理工院校化学化工及其相关专业高年级本科生和研究生编写的,旨在通过本课程的学习,使学生初步掌握化学及相关领域常用软件的使用技巧,具备从事科学研究的化学图文设计能力和初步的分子模拟计算能力。

本书以最新版桌面化学办公系统软件ChemBioOffice2008及量化计算软件包Gaussian03为载体,以化学结构为基础,以结构-性质-模拟计算为主线,通过大量实例和上机操作练习,详细介绍了化学图文设计与分子模拟计算的一般方法,使读者对计算(机)化学及分子模拟计算有一个初步了解,为进一步的深入学习打下基础。

本书既可作为系统学习的教材,也可作为相关软件的使用手册备查,是化学工作者的重要参考书。

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

内容概要

本书以著名的桌面化学办公系统软件ChemBioOffice2008和广泛使用的量化计算软件Gaussian03的使用为例,采用图形界面与文字叙述相对照的方式,详细介绍了化学图文设计和分子模拟计算的方法。内容包括:计算机化学及化学模拟的概念与方法;ChemSketch化学图文绘制技巧;ChemBioDraw化学生物绘图工具的使用方法、结构查询、结构与性质计算;ChemBio3D结构模型构建、修改、显示与输出的方法和技巧;ChemBio3D中量子化学接口软件(MOPAC、Gaussian、Jaguar等)在分子模拟计算中的应用;Gaussian03输入文件的编制、计算作业的运行、计算结果的观察等方法;利用GaussView4.1创建、设置、运行与观察Gaussian输入/输出文件的方法。书中采用众多计算实例,介绍了单点能计算、几何优化计算、频率计算、高精度计算、化学反应路径计算、激发态的计算和溶液中的模拟等计算方法和计算结果的查看。本书可作为化学及相关专业高年级本科生、研究生的教材和化学专业教师及有关研究人员的参考书,也可作为相关软件的使用参考书。

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

书籍目录

第1章 计算机与化学 1.1 计算机与化学 1.1.1 计算机化学 1.1.2 计算化学 1.1.3 理论化学
1.1.4 量子化学 1.2 计算机化学的发展 1.3 我国计算(机)化学的发展概况 1.4 分子模拟与量化计
算简介 1.4.1 分子模拟的意义 1.4.2 分子模拟的一般过程 1.4.3 分子模型的构建 1.4.4 分子模拟的
方法 1.5 常用化学软件简介 1.5.1 化学图文设计软件 1.5.2 计算化学与分子模拟软件 1.5.3 化学数据
库 1.5.4 图谱解析软件 1.5.5 数据处理软件 1.5.6 文献管理软件 1.6 计算化学应用 1.7 计算机化学
的学习方法 1.8 相关网站及参考书第2章 ChemSketch的使用 2.1 ChemSketch概述 2.1.1 主要功能
2.1.2 软件界面 2.2 结构模式 2.2.1 常用工具与快捷按钮 2.2.2 基本操作 2.2.3 高级操作 2.2.4 二维
优化 2.2.5 三维优化 2.2.6 模板的应用 2.2.7 模板的管理 2.3 绘图模式 2.3.1 常用工具与快
捷按钮 2.3.2 反应能量图 2.3.3 原子轨道图 2.3.4 实验装置图 2.4 分子性质的预测第3章
ChemBioDraw的使用 3.1 ChemBioDraw概述 3.1.1 版本介绍 3.1.2 运行系统要求 3.1.3 新特性
3.2 ChemBioDraw工具栏与文档 3.2.1 工具栏与窗口显示 3.2.2 文档操作 3.2.3 页面设置 3.3
ChemBioDraw操作实例 3.3.1 画丙酮分子 3.3.2 使用环工具 3.3.3 画反应式 3.3.4 画中间体 3.3.5
使用碎片工具 3.3.6 画多点配位结构 3.3.7 费歇尔投影式 3.3.8 画透视图 3.3.9 画纽曼投影式
3.3.10 使用立体化学标记 3.3.11 使用模板 3.4 结构式的基本画法第4章 ChemBio3D的使用
第5章 Gaussian的使用第6章 GaussView的使用附录 能量单位

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

章节摘录

插图：第1章 计算机与化学计算机及网络技术的应用现已深入到化学研究的各个领域，使传统化学研究的手段和方法发生了深刻的变化。

如今的化学研究已由纯实验科学，演变为先实验再计算、边实验边计算，直至成为先理论计算再实验验证、实验研究与理论计算相结合的全新科学研究模式，逐步形成了专门研究计算机技术在化学及其相关领域中应用的分支学科——计算机化学与化学模拟。

1.1 计算机与化学自20世纪80年代DOS操作系统问世以来，尤其是90年代中期Windows操作系统的诞生，加上计算机硬件技术的飞速发展，整个计算机系统得到了空前的完善，人类社会的生活方式也发生了革命性变化，互联网把整个世界连成一体，计算机不再是少数高级专门研究人员的特殊工具，已成为普通人群必不可少的工作平台。

目前，化学研究人员可以在计算机上方便地开展研究工作，从而诞生了与计算机相关的众多化学分支学科，促进了研究手段、研究方法的不断更新和完善，并逐步产生了一些新的名词和术语，如计算机化学、计算化学、化学信息学、化学数据库等。

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

编辑推荐

《化学图文设计与分子模拟计算》可作为化学及相关专业高年级本科生、研究生的教材和化学专业教师及有关研究人员的参考书，也可作为相关软件的使用参考书。

<<化学图文设计与分子模拟计算>>

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>