

计算化学



[计算化学_下载链接1](#)

著者:张常群

出版者:高等教育出版社

出版时间:2008年06月

装帧:平装

isbn:9787040193633

《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 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 化工流程稳态模拟

7.2.2 化工流程动态模拟

7.3 化学过程计算机模拟应用实例

7.3.1 二组分理想液态混合物气-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 二组分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 二组分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

作者介绍:

目录:

[计算化学_下载链接1_](#)

标签

FORTRAN语言

计算化学

化学

评论

计算机化学

[计算化学_下载链接1_](#)

书评

[计算化学_下载链接1_](#)