第一图书网, tushu007.com

<<计算化学实验>>

图书基本信息

书名：<<计算化学实验>>

13位ISBN编号：9787303093328

10位ISBN编号：730309332X

出版时间：2008-7

出版时间：北京师范大学出版社

作者：胡红智，马思渝　编

页数：179

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

前言

北京师范大学化学学院从1998年成立化学实验教学中心开始，对实验教学体系进行全面改革，在一级学科平台上建立了实验教学的新体系。
本着“厚基础、宽口径、求创新”的原则，按照“一体化、三层次”的实验教学模式，对实验课程独立设课，将原来依附于四大化学理论课的实验，融合贯通，设为三个层次的实验课程。
第一层次为“化学基础实验”，以基本操作训练为主；第二层次为“化学合成实验”和“化学测量与计算实验”，是在第一层次基础上的提高；第三层次为“化学综合设计实验”，以研究性和设计性实验为主，教学重点进入到初步了解化学研究前沿领域以及与化学密切相关学科交叉领域，学习科学研究的基本思路和方法，熟练掌握各种实验技能，应用多种大型仪器进行实验结果测试分析，全面提高学生的综合素质。
新的实验教学体系为培养学生的创新意识和创新能力搭建了一个广阔的平台，经过近十年的教学实践，已经取得了丰硕的成果。
实验教学改革过程中，教材建设是不可缺少的重要组成部分。
北京师范大学化学实验教学中心在参编了普通高等教育“十五”国家级规划教材《化学基础实验》和《化学合成实验》之后，又组织编写了北京师范大学化学专业实验系列教材：《化学综合实验》《基础化学实验操作规范》《计算化学实验》《化学测量实验》《新编化学合成实验》《有机波谱分析及实验》《化学工程基础实验》。
该化学专业实验系列教材由北京师范大学化学学院一批长期承担化学实验教学的教师积多年实验教学经验编写而成，较全面地涵盖了化学专业的学生在大学四年学习期间所必须掌握的化学实验相关知识和实验技能，同时还涉及部分当今化学研究的前沿领域和与化学密切相关的交叉学科的内容。
这套系列教材不仅适合于综合性大学和高等师范院校类的化学专业本科生和研究生使用，也可供从事化学科学研究的人员以及与化学密切相关的交叉学科的研究人员参考。
该化学实验系列教材是实验教学改革的成果，改革是一个不断完善的过程。
希望通过实验教学的改革、实验教材的建设，进一步提高高等院校的实验教学水平，培养更多的综合素质好、实验技能高的化学专业人才。

第一图书网, tushu007.com

内容概要

本书是根据教育部关于“高等教育面向21世纪教学内容和课程体系改革”精神而设计的针对大学本科生的一门全新课程。
试图推广通过计算机程序求解分子波动方程，从而进行理论预测和科学研究新手段的应用。
全书由实验、理论和计算工具3个部分及1个附录——“自洽场过程的数学方法”组成。
实验部分含10个独立的计算设计，从基本的分子构型优化与过渡态计算技术出发（前2个实验），本着使用不同的量子化学方法，涉及不同专业的研究思路设计而成，希望成为利用计算化学手段进行化学信息的理论预测和科学研究的示范。
从初学者角度，各实验除对相关计算技术详细介绍外（以Gaussian的使用为主），对涉及的计算原理也进行了定性的描述。
理论部分则是系统地对量子化学计算的理论方法进行定量描述，以满足阅读者进一步求知的愿望。
计算工具部分主要是对计算机程序使用的介绍，除Gaussian程序外，还介绍了GAMESS、Spartan等重要程序以及一些辅助程序如GaussView和Chem3D等用图形界面建构分子坐标输入的功能等。
附录是对HF（Hartree Fock方法，计算化学理论框架的基础）求解的数学过程介绍，还强调了其中的原子轨道线性组合（LCAO）近似中由原子轨道展开系数构成的密度矩阵的重要的物理意义——分子中电荷分布及其变化情况的揭示，正是分子性质及其变化的本质原因。
本书可作为化学专业以及相关的生命科学、环境科学、材料学、药学、农学和林学等的本科生和研究生教材，也可供相关专业的科研人员参考。

第一图书网, tushu007.com

书籍目录

第一部分 实验部分　实验一 GAUSSIAN程序使用：分子结构计算的输入　实验二 GAUSSIAN程序使用：过渡态计算　实验三 2-亚氨基丁烷的稳定构象及其异构化反应的理论研究　实验四 3-亚氨基戊烷稳定构象及其异构化反应的理论研究　实验五 N-3-丁烯基硝酮分子内环加成反应产物转移性的理论研究　实验六 乙烯酮亚氨衍生物扭曲失共轭本质的理论研究　实验七 氯代环丙烷振动光谱和简振模分析的理论研究　实验八 卟吩内氢迁移反应机理的理论研究　实验九 磷原子团簇P5稳定结构的理论计算　实验十 激发态结构及光化学反应的理论研究　参考文献第二部分 理论部分　第一章 量子化学从头算（AB INITIO）方法　第二章 半经验分子轨道法　第三章 包含电子相关的分子轨道理论　第四章 密度泛函理论（DFT）　参考文献第三部分 计算工具部分　第一章 G03W使用简介　第二章 GAMESS使用简介　第三章 SPARTAN使用简介　参考文献附录 自洽场过程的数学方法 参考文献

章节摘录

实验一 Gaussian程序使用：分子结构计算的输入　　1.1 实验目的作为一门实验课程，主要目的是从实际操作出发，掌握程序的使用，以便得到预期的结果。
对于所涉及的理论和方法，只要求结合程序的演算能够定性予以理解。
本实验作为开始，如标题所言，其涉及的程序操作技术如下：（1）程序的控制性文件设置，通过一个叫Link 0的子程序完成。
（2）作业类型设定，即通过一个或一组关键词指定程序要做的作业。
其中最重要的关键词，是本实验要用到的HF（Hartree-Fokk自洽场分子轨道）方法和一些简单的基组。
本实验的后面将会对其予以定性描述，更为详细的介绍参见理论部分，供有兴趣的同学进一步学习参考。
（3）分子输入，即用内坐标（用键长、键角、二面角这3个变量定义分子中原子核的位置）方法为目标分子设定计算的坐标。
（4）计算结果的解读，包括两方面的内容：其一是对计算过程的正确理解，我们在本实验后附了一个水分子优化算例输出的要点提示，可参照该算例的具体输出加以理解；其二是正确采集有用的结果数据，我们将在实验报告要求中给出具体的要求。
　　1.2　关于Gaussian程序目前有许多很好的计算化学的程序，Gaussian（www.gaussian.com）程序是一个最普及的程序，它最早的版本是1970年的Gaussian 70，最新的版本是Gaussian 03。
它可以进行各种类型的从头算、半经验和密度泛函（DFT）计算，而且有PC机的版本，很容易使用。
　此外，GAMESS（www.msg.ameslab.gov/GAMESS）是另一个被普遍使用的程序，而且是免费的非商业软件。
Spartan（www.wavefun.com）是一个很便利的程序，被有机和有机金属化学家广泛使用。
Q-Chem（www.q-chem.com）和Spartan，多用于超出HF水平的计算。
MOPAC（www.schrodinger.com）和AMPAC（www.semichem.com）是两个主要进行半经验计算的软件。

编辑推荐

《计算化学实验》可作为化学专业以及相关的生命科学、环境科学、材料学、药学、农学和林学等的本科生和研究生教材，也可供相关专业的科研人员参考。

第一图书网, tushu007.com

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