<<分子模拟基础>>

图书基本信息

书名: <<分子模拟基础>>

13位ISBN编号: 9787562253136

10位ISBN编号:7562253137

出版时间:2011-12

出版时间:华中师范大学出版社

作者:李永健,陈喜

页数:194

字数:222000

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

<<分子模拟基础>>

内容概要

《高校教材系列:分子模拟基础》是分子模拟的一本入门书。

书中简要介绍了分子模拟的基础理论知识,详细介绍了利用Gaussian03软件来研究计算分子的单点能、电荷的分布、偶极距的计算、几何构型的优化、频率的计算、过渡态的寻找及化学反应途径的研究

。《高校教材系列:分子模拟基础》中还编入了七个上机实验,内容主要包括单点能、频率的计算、过 渡态的寻找和化学反应途径的研究。

最后还介绍了GaussianView的使用方法和操作技巧。

<<分子模拟基础>>

书籍目录

ルヤ	١٨.
2石	ない

第1章 理论背景

- 1.1 计算化学
- 1.1.1 基本理论及计算软件
- 1.1.2 模型化学
- 1.2 基组
- 1.2.1 Slater轨道和Gaussian轨道
- 1.2.2 最小基组
- 1.2.3 分裂价层基组
- 1.2.4 极化基组
- 1.2.5 弥散函数
- 1.2.6 高角动量基组
- 1.2.7 有效核势能基组
- 1.3 理论方法
- 1.3.1 分子力学和分子动力学基础理论
- 1.3.2 电子结构理论

第2章 量子力学基本原理

- 2.1 量子化学从头算方法
- 2.1.1 Schrodinger方程及三个近似
- 2.1.2 几种主要积分
- 2.1.3 从头算计算的自洽场方程
- 2.2 电子相关模型 (post Hartree-Fock理论)
- 2.2.1 组态相互作用模型
- 2.2.2 微扰理论
- 2.3 密度泛函理论
- 2.4 半经验方法

第3章 单点能计算

- 3.1 单点能
- 3.1.1 势能面
- 3.1.2 单点能计算
- 3.2 计算设置
- 3.2.1 体系的原子坐标输入
- 3.2.2 计算关键词
- 3.3 输入文件
- 3.4 输出文件中的信息
- 3.4.1 标准几何坐标
- 3.4.2 能量
- 3.4.3 分子轨道和轨道能级
- 3.4.4 电荷分布
- 3.4.5 偶极矩和多极矩
- 3.4.6 CPU时间和其他
- 3.5 核磁共振计算
- 3.6 练习

第4章 几何构型优化

4.1 势能面的驻点

<<分子模拟基础>>

- 4.1.1 能量梯度的解析表达式
- 4.1.2 极值点及鞍点
- 4.2 寻找极小值
- 4.2.1 收敛标准
- 4.2.2 几何构型优化的输入文件
- 4.2.3 输出文件
- 4.3 难处理的优化
- 4.4 练习

第5章 频率分析计算

- 5.1 预测红外和拉曼光谱
- 5.1.1 频率分析输入文件
- 5.1.2 频率和强度
- 5.1.3 频率和零点能的矫正
- 5.1.4 简正模式
- 5.2 热化学
- 5.2.1 分子的生成焓
- 5.2.2 零点能和热能
- 5.3 极化率和超极化率
- 5.4 表征驻点的性质
- 5.5 练习

第6章 化学反应途径

- 6.1 势能面与化学反应
- 6.1.1 过渡态结构与反应路径
- 6.1.2 过渡态几何构型的优化
- 6.2 反应的内禀反应坐标
- 6.3 计算反应焓变
- 6.4 等键反应

第7章 高精度能量模型

- 7.1 预测热化学
- 7.1.1 原子化能
- 7.1.2 电子亲和势
- 7.1.3 离子化能
- 7.1.4 质子亲和能
- 7.2 理论模型的评价
- 7.3 理论模型的相对精确性
- 7.4 组合方法
- 7.4.1 GaussianI和Gaussian2理论
- 7.4.2 完全基组方法
- 7.5 练习

第8章 激发态计算

- 8.1 运行激发态计算
- 8.2 激发态优化和频率分析
- 8.3 练习

第9章 溶液中的模型系统

- 9.1 溶剂化效应
- 9.2 反应场模型
- 9.3 运行SCRF计算

<<分子模拟基础>>

- 9.3.1 运行SCRF计算
- 9.3.2 分子体积计算
- 9.4 练习
- 第10章 分子对接方法
- 10.1 分子对接的原理
- 10.2 分子对接的种类
- 10.3 常用分子对接方法
- 10.3.1 DOCK方法
- 10.3.2 AUTODOCK方法
- 10.3.3 FlexX方法
- 10.3.4 GOLD方法
- 10.4 利用DOCK程序进行对接的操作步骤
- 第11章 上机操作实验
- 实验一 1,2-二氯-1,2-二氟乙烷分子几何构型输入法及气态能量计算
- 实验二 丙烯分子几何构型的优化--极小值点的寻找
- 实验三 振动频率计算
- 实验四 几何构型优化--寻找过渡态(一阶鞍点)
- 实验五 SN2反应途径的量子化学研究
- 实验六 甲醛分子势能面研究
- 实验七 Diels-Alder加成反应相对活性的理论研究
- 第12章 Gaussian View使用及技巧
- 12.1 基本操作
- 12.1.1 创建新分子
- 12.1.2 调整原子之间的距离
- 12.1.3 调整键角大小
- 12.1.4 调整二面角大小
- 12.1.5 选择计算类型
- 12.1.6 计算方法和基组的选择
- 12.1.7 基组的设置
- 12.1.8 电荷和自旋多重度的设置
- 12.1.9 计算结果的概括性分析显示
- 12.1.10 原子的电荷分布
- 12.1.11 振动频率分析显示
- 12.2 高级技巧
- 12.2.1 三个变形工具
- 12.2.2 利用加氢工具获得最佳成键位置
- 12.2.3 基团取代工具
- 12.2.4 点群工具
- 12.2.5 合并原子
- 12.2.6 平移分子的部分基团
- 12.2.7 旋转分子的部分基团
- 12.2.8 显示坐标轴可以更准确地添加原子
- 12.3 几个实例来具体说明上述技巧的使用
- 12.3.1 构造乙烷的重叠式构象
- 12.3.2 平行的环戊烯分子
- 12.3.3 构造二茂铁结构
- 12.3.4 搭建富勒烯C20分子

<<分子模拟基础>>

参考文献

<<分子模拟基础>>

编辑推荐

李永健、陈喜编著的《分子模拟基础》共分12章,第1章简要介绍了理论化学计算的发展及理论背景;第2章介绍量子力学的基本原理;第3章至第6章较详细地介绍了如何利用Gaussian03来研究体系是气态的单点能、电荷分布、分子轨道、几何构型的优化、频率的计算及化学反应途径等。第7章至第10章主要是对高精度能量模型、激发态、溶液模型及分子对接进行了简单的介绍;第11章是上机实验部分;第12章是关于Gaussian View的使用技巧。

<<分子模拟基础>>

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