

# 《分子模拟实验》

## 图书基本信息

书名：《分子模拟实验》

13位ISBN编号：9787040303476

10位ISBN编号：7040303477

出版时间：2010-9

出版社：武汉大学、王宝山、侯华 高等教育出版社 (2010-09出版)

页数：135

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《分子模拟实验》

## 前言

计算化学早已成为一套有效、有用、有利的化学研究手段。然而，作为化学专业本科生必修课的结构化学，仍然停留在公式与理论的课堂灌输层面。本实验教材就是为了解决这种不协调的教学局面而编写的。采用Chem3D应用软件，结合GAMESS、Mopac等量子化学计算程序与MM2分子动力学模拟程序，对化学热点科学问题进行计算模拟，培养学生的理论思维，激发学生的科研兴趣。本实验教材内容丰富，不但包含了当前应用广泛的电子相关理论及密度泛函理论，而且涵盖了从小分子到生物大分子的化学体系；不但涉及分子几何结构的创建、电子结构分析、热力学参数计算、光谱模拟（红外、紫外、拉曼、核磁）等常规计算，而且包括分子-分子之间的相互作用、化学反应动力学（中间体、过渡态、活化能）、分子动力学模拟等热点问题。本教材共分三个部分。第一部分简要总结了量子化学及经典分子力学的基础理论知识；第二部分详细介绍了Chem3D的使用方法与技巧，以供学生随时查阅；第三部分设计了六个具有代表性的典型实验与一个综合实验，每个实验后均有相应的练习题，以巩固所学知识。本书由武汉大学化学与分子科学学院王宝山和侯华共同编写。程功臻教授对分子模拟实验的开设以及本书的编写给予了大力支持与帮助，在此表示衷心的感谢！本书承蒙中国科学院化学研究所研究员孔繁敖教授，山东大学刘成卜教授以及华东师范大学、纽约大学张增辉教授审阅。三位教授提出许多宝贵的建设性修改意见，在此致以诚挚的谢意！高等教育出版社鲍浩波编辑对书稿提出了许多建设性的修改意见，对本书的出版给予了自始至终的关心与支持，在此致以诚挚的谢意！限于编者的水平，本书难免存在不少纰漏，恳请读者批评指正！

# 《分子模拟实验》

## 内容概要

《分子模拟实验》共分三部分。第一部分简要总结了量子化学及经典分子力学的基础理论知识；第二部分详细介绍了chem3D的使用方法与技巧，以供学生随时查阅；第三部分设计了六个具有代表性的典型实验与一个综合实验，每个实验后均有相应的练习题，以巩固所学知识。

《分子模拟实验》可作为综合性大学和高等师范院校化学类专业结构化学课程的配套实验教材。

# 《分子模拟实验》

## 书籍目录

绪论第一部分 基本理论及计算方法简介第一章 量子力学方法1.1 Hartree-Fock与Hartree-Fock-Roothaan方程Schrodinger方程Born-Oppenheimer近似Hartree近似及自洽场方法原子轨道的线性组合(linear combination of atomic orbitals, LCAO)近似Hartree-Fock近似及Roothaan-Hall方程1.2 电子相关模型(post Hartree-Fock理论)组态相互作用(configuration interaction, CI)模型微扰理论1.3 密度泛函理论1.4 基组原子轨道的线性组合(LCAO)Slater类型轨道(slater-type orbitals, STO)基组Gaussian类型轨道(Gaussian-type orbitals, GTO)基组收缩基组(STO-nG基组)分裂价基组1.5 半经验方法全略微分重叠(CNDO, complete neglect of differential overlap)间略微分重叠(INDO, intermediate neglect of differential overlap)忽略双电子微分重叠(NDDO, neglect of diatomic differential overlap)EHMO(扩展的Huckel分子轨道方法)和PPP(Pafiser-Parr-People)方法1.6 分子等值面图及性质图等值面图分子轨道(molecular orbitals)图电子密度(electron density)图电子自旋密度(electron spin density)图静电势(electrostatic potential)图电子密度映射图静电势映射图分子轨道映射图第二章 分子力学方法2.1 势能函数形式伸缩势(Estretch), 弯曲势(Ebend), 扭转势(Etorsion)非键相互作用势(Enon-bonded)2.2 力场参数2.3 原子类型、化学键类型2.4 常见力场类型第三章 分子动力学模拟3.1 分子动力学模拟的基本流程3.2 分子动力学模拟运动方程的求解运动方程势能函数 $y(r)$ 运动方程的积分算法初始化条件3.3 统计系综NVE系综(微正则系综)NVT系综(正则系综)NPT系综(恒温恒压系综)NPH系综(恒焓恒压系综)3.4 结果分析3.5 周期性边界条件第四章 分子构型优化及溶剂化模型4.1 分子构型优化势能面构型优化4.2 溶剂化效应显式溶剂化模型隐式溶剂化模型参考文献第二部分 chem3D软件简介第五章 Chem3D软件设置1. 打开菜单“File Preferences”, 进行设置2. 打开菜单“File Model Settings”进行设置3. 视窗(view)菜单的设置4. 工具栏(toolbars)的设置5. 关闭Chem3D-第六章 Chem3D软件详解1. 菜单和工具栏区2. 文件菜单部分3. 编辑4. 视窗5. 结构6. 计算模块7. 分子面模块8. 工具栏9. Chem3D支持的文件格式10. 振动模式第三部分 实验内容第七章 分子结构模型创建和优化计算7.1 建模的三种方式1. 分子式输入直接建模法2. 化学键建模法3. 利用ChemDraw二维平面图建模4. 其他建模方式7.2 结构处理1. 加氢饱和价键2. 加电荷7.3 结构调整和优化7.4 分子结构的确定1. 原子类型的确认2. 分子结构的合理显示第八章 分子轨道计算和分析8.1 分子轨道等值面图8.2 总电子密度图8.3 静电势图8.4 静电势、分子轨道对总电子密度的映射图8.5 电子自旋密度图8.6 溶剂面第九章 势能面计算9.1 分子的解离能量曲线9.2 复杂分子之间的弱相互作用模拟9.3 分子构象搜索9.4 H<sub>3</sub>体系共线势能面的模拟第十章 化学反应模拟10.1 热力学参数的计算10.2 优化搜索过渡态1. 过渡态猜测和优化2. 过渡态的确认3. 氢抽提反应10.3 溶剂化效应第十一章 分子光谱模拟11.1 红外光谱模拟11.2 拉曼光谱模拟11.3 紫外可见光谱模拟11.4 核磁共振(NMR)谱模拟第十二章 生物大分子模拟12.1 蛋白质和DNA的立体结构12.2 分子对接12.3 分子动力学模拟第十三章 综合实验1. 反应物和产物分子的电子结构2. 构象搜索与分子间长程相互作用3. 反应途径计算4. 光谱模拟5. 分子动力学模拟附录附录I 绘制三维图形附录 非线性拟合附录 红外光谱图模拟书评一书评二书评三

# 《分子模拟实验》

## 章节摘录

插图：量子化学是一门以量子力学原理为基础的科学。虽然量子力学理论框架早在19世纪初就已经建立起来，但直到近百年后，量子力学才被大量应用于处理实际问题。这主要是归功于计算机技术的发展，将复杂的数学公式编制成计算机程序和软件，进行数值计算，从而获得可以与实验结果直接或间接相比较的结果。特别是近年来，随着计算机硬件计算速度的提高和量子化学计算软件的不断改进和完善，已经可以在普通微型计算机上完成小规模量子化学模拟计算了。因此，计算化学正逐渐变成交叉学科，成为一种强有力的工具，在化学、生命科学、材料科学等方面发挥着重要的辅助作用。针对化学问题的计算化学，因为其研究对象是化学意义上的分子或原子，所以通常被称为“分子模拟”。一般来说，分子模拟包括两大类，一类是量子力学（quantum mechanics）模型，简称QM模型；另一类是分子力学（molecular mechanics）模型，简称MM模型。两者的主要区别在于解决问题的出发点不同。

# 《分子模拟实验》

## 编辑推荐

《分子模拟实验》：高等学校化学实验教材

# 《分子模拟实验》

## 精彩短评

- 1、chem3D为示例软件，内容编排上挺清晰的
- 2、该书将抽象难懂的量子化学理论与分子模拟软件结合，通过类似“实验”的方法，介绍了常见的结构化学研究方法，对于初学量子化学计算很有帮助。只是既然定位是实验书，书中却没有实验步骤与仪器（软件使用的中间结果）！甚至连有关ChemOffice软件（不是主流量子化学计算软件）的版本都不说明，读者很难得出与书中一致的实验结果就不奇怪了！
- 3、该书不错，内容虽然不多，但基本上做了大致的介绍。目前，国内专业方面系统的书籍还比较缺乏，这类书算是比较难得的。
- 4、内容比较丰富，例题较多
- 5、书很好很好，超赞，只不过现在还看不太懂滴
- 6、大致看了一下，作者很熟悉量子化学这个领域，其中的材料应该来源于作者的一手资料，对于配合结构化学课程的话，就一般院校而言，选材有待商榷。此前已有北师大出版过类似书籍，也许作者想避开内容上的雷同而为之，读来感觉与结构化学不“和谐”。如果配合量子化学或分子模拟课程，则内容又显单薄了些。其次，在计算软件上，作者舍弃了“大众”的GAUSSIAN而选择了相对“小众”GAMES这个免费软件，对于入门者来讲，可能不是一个好事情，尽管后者功能也非常强大甚至在某些方面超过了前者，但毕竟不主流。当然，如果作者有意推广免费软件（尤其是对许多穷书生），那就另当别论了。
- 7、化学的同学可以看看，简单来说这是本类似软件手册的书，前面的理论特别精简，DFT居然只写了两页。而chem3D这款软件操作介绍了二三十页，这个真的用处不大。
- 8、感觉就是为了一本书才写得，写得不咋滴

# 《分子模拟实验》

## 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:[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)