

## <<计算化学>>

### 图书基本信息

书名：<<计算化学>>

13位ISBN编号：9787030233523

10位ISBN编号：7030233522

出版时间：2009-3

出版时间：科学出版社

作者：陈敏伯

页数：391

字数：492000

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>

## &lt;&lt;计算化学&gt;&gt;

## 前言

在21世纪曙光初露，中国科技、教育面临重大改革和蓬勃发展之际，《中国科学院研究生教学丛书》——这套凝聚了中国科学院新老科学家、研究生导师们多年心血的研究生教材面世了，相信这套丛书的出版，会在一定程度上缓解研究生教材不足的困难，对提高研究生教育质量起着积极的推动作用。

21世纪将是科学技术日新月异，迅猛发展的新世纪，科学技术将成为经济发展的最重要的资源和不竭的动力，成为经济和社会发展的首要推动力量，世界各国之间综合国力的竞争，实质上是科技实力的竞争，而一个国家科技实力的决定因素是它所拥有的科技人才的数量和质量，我国要想在21世纪顺利地实施“科教兴国”和“可持续发展”战略，实现邓小平同志规划的第三步战略目标——把我国建设成中等发达国家，关键在于培养造就一支数量宏大、素质优良、结构合理、有能力参与国际竞争与合作的科技大军，这是摆在我国高等教育面前的一项十分繁重而光荣的战略任务。

中国科学院作为我国自然科学与高新技术的综合研究与发展中心，在建院之初就明确了出成果出人才并举的办院宗旨，长期坚持走科研与教育相结合的道路，发挥了高级科技专家多、科研条件好、科研水平高的优势，结合科研工作，积极培养研究生；在出成果的同时，为国家培养了数以万计的研究生，当前，中国科学院正在按照江泽民同志关于中国科学院要努力建设好“三个基地”的指示，在建设具有国际先进水平的科学研究基地和促进高新技术产业发展基地的同时，加强研究生教育，努力建设好高级人才培养基地，在肩负起发展我国科学技术及促进高新技术产业发展重任的同时，为国家源源不断地培养输送大批高级科技人才。

## &lt;&lt;计算化学&gt;&gt;

## 内容概要

计算化学是近年来飞速发展的一门学科，它主要以分子模拟为工具实现各种核心化学问题的计算，架起了理论化学和实验化学之间的桥梁。

本书在一个比较严格的理论框架中介绍了计算化学。

全书分两部分：基本原理篇和应用篇，共11章。

基本原理篇（第1-6章）包括：体系的经典力学描述，势能面，分子动力学方法，Monte Carlo模拟，相关函数和近平衡态的量子统计理论；应用篇（第7-11章）包括：热化学，输运性质，分子光谱的模拟，固体材料和统计数学在药物、材料设计上的应用。

本书尽量介绍具有物理意义的方法，不得已才采用单纯的数学模型。

为了方便阅读，本书备有附录用来介绍重要的数学工具。

本书可作为化学、物理、材料科学、药学、生命科学等有关专业领域高校教师、科研人员的参考书和研究生教材。

## &lt;&lt;计算化学&gt;&gt;

## 书籍目录

序前言符号说明绪言参考文献基本原理篇	第1章 体系的经典力学描述	1.1 基本概念	1.2 经典力学
	1.2.1 最小作用量原理和Lagrange方程	1.2.2 Hamilton E则方程	1.2.3 最小作用量原理与: Hamilton正则方程
	1.2.4 Hamilton—Jacobi方程	参考文献	第2章 势能面
Hohenberg-Kohn第一定理	2.2 分子结构文件表达方法	2.2.1 直角坐标表达法	2.2.2 内坐标法
2.3 势能面及其特征	2.4 力场方法	2.4.1 力场方法的势能表达形式	2.4.2 力场方法的本质和改进
2.5 能量极小化	2.5.1 单纯形法	2.5.2 最速下降法	2.5.3 共轭梯度法
2.5.4 Newton-Raphson法	2.6 寻找过渡态	2.6.1 过渡态附近的势能面特征	2.6.2 势能梯度的模方
参考文献	第3章 分子动力学方法	3.1 初等分子动力学原理	3.1.1 Verlet法
3.1.2 蛙跳法	3.1.3 速度Verlet法	3.1.4 位置Verlet法	3.1.5 Beeman法
3.1.6 Gear法	3.2 随机动力学模拟	3.2.1 Langovin方程及其形式解	3.2.2 随机动力学中的蛙跳法
3.3 限制性和约束性分子动力学模拟	3.3.1 限制性分子动力学模拟	3.3.2 约束性分子动力学模拟——SHAKE法	3.3.3 约束性分子动力学模拟——SHAKE法
3.4 恒压体系的模拟	3.4.1 标度变换恒压法	3.4.2 (NpH)系综的恒压扩展法(Andersen法)	3.4.3 晶胞可变的(NpH)系综的模拟——Parrinello-Rahman法
3.5 恒温体系的模拟	3.5.1 Woodcock变标度恒温法	3.5.2 Berendsen变标度恒温法	3.5.3 Andersen热浴法
3.5.4 恒温扩展法——Nose动力学	3.5.5 Hoover动力学	3.6 经典力学及其算符方法	3.6.1 概率密度分布函数、Liouville方程
3.6.2 经典Liouville算符、力学量的时间演化	3.6.3 经典演化算符、时间反演对称性	3.6.4 Trotter定理和经典演化算符的因子化	3.7 多重时间尺度积分的分子动力学模拟
3.8 Hamilton体系的辛算法	3.8.1 Hamilton力学的辛结构	3.8.2 正则变换的辛结构	3.8.3 线性Hamilton体系
3.8.4 线性Hamilton体系的基于Pade逼近的辛格式	3.8.5 非线性Hamilton体系的Euler中点辛格式	3.8.6 辛算法实例	3.9 Poincae回归定理与分子动力学模拟
3.9.1 Poincare回归定理	.....	第4章 Monte Carlo模拟	第5章 相关函数
第6章 近平衡态的量子统计理论应用篇	第7章 热化学	第8章 输运性质	第9章 分子光谱的模拟
第10章 固体材料	第11章 统计数学在药物、材料设计上的应用	附录索引	

## 章节摘录

第2章 势能面 “我们不说那些由基本原理推(导)不出来的话。

”——录自喀兴林教授的书《高等量子力学》，高等教育出版社1999年版，第80页 本章从介绍Hohenberg - Kohn第一定理开始，在严格的量子理论的基础上建立“结构决定一切”的思想.明确了对于处于基态的化学体系，只要知道它们的核骨架即分子结构，原则上就能以此为起点着手计算该体系的所有化学性质，核骨架就是位形空间中心位形，由此引出势能超曲面，简称势能面，分析势能面的几何特点，尤其是其中的极小点（即构象）和过渡态。

通常分子模拟的第一步都是在计算机上采用各种分子设计软件构建分子模型，接下来再进行几何优化、构象分析以期得到分子的基态结构，为此本章再介绍几种能量优化的方法：单纯形法、最速下降法、共轭梯度法、Newton - Raphson法以及寻找过渡态的几种方法。

2.1 Hohenberg - Kohn第一定理 由很多个电子和不同种类的多个原子核构成的体系称为“多电子体系”，化学体系就其物质的根本组成来说也是一种多电子体系，化学家在其为数不多的科学判据中，很久以来就有一条结论：分子结构决定了分子的性质.这是化学家长期以来根据实验事实归纳得到的经验，从来也没有被严格证明过，1964：年，加利福尼亚州大学的Walter Kohn教授和Hohenberg博士从Schrödinger方程出发“严格”地证明了它，构成了Kohn荣获1998年诺贝尔化学奖的部分成就。

Hohenberg - Kohn第一定理 多电子体系若其基态是非简并的，则该基态体系中核与电子的相互作用势能 $v(r)$ 唯一地取决于体系的电子密度 $\rho(r)$ （只差一个无关紧要的常数） 证明 显然，体系核骨架的几何形状决定了 $v(r)$ ，从Schrödinger方程出发，用反证法求证如下。

## <<计算化学>>

### 编辑推荐

《计算化学：从理论化学到分子模拟》——这套凝聚了中国科学院新老科学家、研究生导师们多年心血的研究生教材面世了，相信这套丛书的出版，会在一定程度上缓解研究生教材不足困难，对提高研究生教育质量起着积极的推动作用。

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>