

<<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

绪论

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 Gaussian1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。

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>