

<<计算机化学实践基础教程>>

图书基本信息

书名：<<计算机化学实践基础教程>>

13位ISBN编号：9787030371331

10位ISBN编号：703037133X

出版时间：2013-3

出版时间：科学出版社

作者：胡建平 编

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>

## <<计算机化学实践基础教程>>

### 内容概要

《计算机化学实践基础教程》从计算机化学新手的实际要求出发，针对学生在日常学习计算机化学过程中可能会碰到的各种问题以回答的方式进行讲解，并在讲解中使用大量对新手有帮助的操作技巧和方法。

《计算机化学实践基础教程》为读者安排了如下内容：化学信息库、分子结构绘制及显示、Linux基础知识、几款常用化学分子模拟软件、文件传输、数据统计、数据处理及科学作图、文本编辑、图形处理、动画及课件制作、程序编写、每一个章节成体系，靠工作主线联系章节。

## <<计算机化学实践基础教程>>

### 作者简介

胡建平，1978年生，博士，教授，湖南永州人。

1999年毕业于吉林大学生命科学学院生物制药专业；2008年毕业于北京工业大学生命科学与生物工程学院生物医学工程专业，获得北京工业大学优秀博士学位论文奖。

从2000年至今，一直从事生物大分子结构及动力学的计算机模拟和分子设计研究。

目前主要致力于蛋白质-配体的相互作用与复合物结构预测、蛋白质折叠机理与功能研究，以及计算机辅助药物设计与筛选等方面的研究工作。

在国内外期刊及会议上发表学术论文60余篇，SCI检索30余篇。

主持2项国家自然科学基金、2项教育部等省部级基金和4项教育厅等市厅级基金。

目前是中国生物物理学会会员，四川省“生物有机化学与表面科学重点实验室”主要成员，乐山师范学院校级研究机构“分子设计中心”主任。

## &lt;&lt;计算机化学实践基础教程&gt;&gt;

## 书籍目录

前言 第一章化学信息学网络资源 第一节化学信息学数据库 第二节电子图书阅读工具—  
—AdobeAcrobat 第三节蛋白质结构数据库 第四节文献数据库——WebofScience 参考文献 第二章分子结构  
绘制及显示 第一节小分子结构绘制及创建——ChemDraw 第二节小分子结构显示——Chem3D 第三  
节生物大分子结构显示——VMD 第四节生物大分子结构显示——Spdbv 参考文献 第三章Linux基础 第  
一节Linux简介 第二节文件操作命令 第三节目录操作及联机帮助命令 第四节进程及其管理 第五节文本  
编辑 参考文献 第四章分子模拟 第一节分子对接——AutoDock 第二节分子动力学模拟——AMBER 第  
三节量子化学计算——Gaussian 参考文献 第五章数据传输 第一节常规下载——FlashGet 第二节数据上  
传——CuteFTP 第三节远程连接——Xmanager 参考文献 第六章数据分析与绘图 第一节数据分析—  
—Excel 第二节数据绘图——Origin 第三节统计软件——SPSS 参考文献 第七章图像处理 第一节简单绘  
图——画图附件 第二节图像编辑——Photoshop 第三节图像绘制——CorelDraw 参考文献 第八章计算  
机应用基础 第一节文本编辑——Word 第二节文本列操作——UltraEdit 第三节流程图绘制——Visio 第  
四节演示文稿制作——PowerPoint 参考文献 第九章Perl语言初步 第一节Perl安装及启动 第二节Perl的基  
本语法 第三节Perl的使用实例 参考文献 第十章HIV—1整合酶与L708, 906抑制剂结合模式及运动性的  
研究 第一节计算方法 第二节结果与讨论 第三节与《计算机化学实践基础教程》的关联 参考文献 附录

## &lt;&lt;计算机化学实践基础教程&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：（1）极小基组（Minimal Basis set）。

STO—3G，每一个基函数中含有3个高斯函数，于是就有了3G的名称，STO代表Slater型的轨道。

（2）分裂基组（Split valence Basis set）。

每个原子内层轨道用一个STO—KG逼近，每个原子价层轨道用2个或3个新的具有不同指数的STO—KG逼近。

如6—31G，其中每个内层轨道用1个STO—6G逼近，而每个原子价层轨道用1个STO—3G和1个STO—1G逼近。

（3）双基组（Double—zeta Basis Set）。

对每个轨道都用2个STO逼近，内层轨道取较大的n值（为了逼近歧点性质），外层轨道取较小的n值；如D95和D95V。

（4）极化基组（Polarization Basis Set）。

分裂基组允许轨道改变其大小，但不能改变形状。

极化基组则取消了这样的限制，增加了角动量。

例如，在碳原子上增加d轨道的成分，在过渡金属上增加f轨道成分，在氢原子上增加p轨道成分。

常用的极化基组是6—31G（d），也称为6—31G，这个基组来源于6—31G基组，并在其基础上，对于重原子增加了d轨道的成分。

另一个常用的极化基组是6—31G（d，p），也称为6—31G，在前一个极化基组的基础上，再在氢原子轨道中加入了p轨道的成分。

（5）弥散函数（Diffuse Function）。

对于含有孤对电子的分子及阴离子，在较远处仍有可观的电子密度。

为了反映这个化学事实，可以对非氢原子在极化基组的基础上再增加轨道指数特别小的s、P<sub>x</sub>、P<sub>y</sub>、P<sub>z</sub>这4个高度扩展的Gauss函数，记为6—31+G；如果在氢原子上再增加一个高度扩展的S型Gauss函数，则记为6—31++G基组。

（6）高角动量基组（High Angular Momentum Basis Set）。

现在使用的更大的基组，是在分裂基组基础上增加多个角动量。

例如，6—31G（2d）就是在6—31G基础上增加2个d轨道的函数，而6—311++G（3dr，3pd）则增加了更多的极化函数，包括3个分裂的价键基组，在重原子和氢原子上增加的弥散函数，在重原子上增加的3个d函数和一个f函数，在氢原子上增加的3个p函数和1个d函数。

这样的基组在电子相关方法中，对于描述电子之间的作用有很重要意义，这些基组一般不用于HF计算。

（7）第三周期以上原子的基组（Basis Sets for Post—third—row Atom）。

第三周期以上原子的基组很难处理。

由于存在非常大的核，原子核附近的电子通过有效核电势方法（膺势场ECP）进行了近似，这一处理同时也包含了相对论效应。

这其中，LANL2DZ是最有名的基组，它对第一行原子是D95V，对Na—Bi是Los Alamos ECP加上DZ。

（8）Dunning相关一致基组（Dunning's Correlation Consisted Basis Set）。

cc—pVDZ、cc—pVTZ、ccc—VQZ、cc—pVSZ、cc—pV62，分别为双—zeta，三—zeta，四—zeta，五—zeta，六zeta，为了提高计算效率，这些基组删除了多余的函数并进行了旋转，这些基组可以通过给基组关键字添加“ AUG— ”前缀来增加弥散函数。

## <<计算机化学实践基础教程>>

### 编辑推荐

《计算机化学实践基础教程》编委会抓住本科院校计算机化学教学的关键，以科学研究促进教材编写，实现科学研究和教学的相互促进。

《计算机化学实践基础教程》以软件学习和任务驱动为主线，力图用最直观的方式使初学者在最短的时间内了解计算机化学软件的基本功能。

《计算机化学实践基础教程》主要是为本科院校化学及相关专业高年级本科生和研究生编写的，按照从事计算机化学科学研究所需理论以及技术知识顺序而编排。

<<计算机化学实践基础教程>>

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>