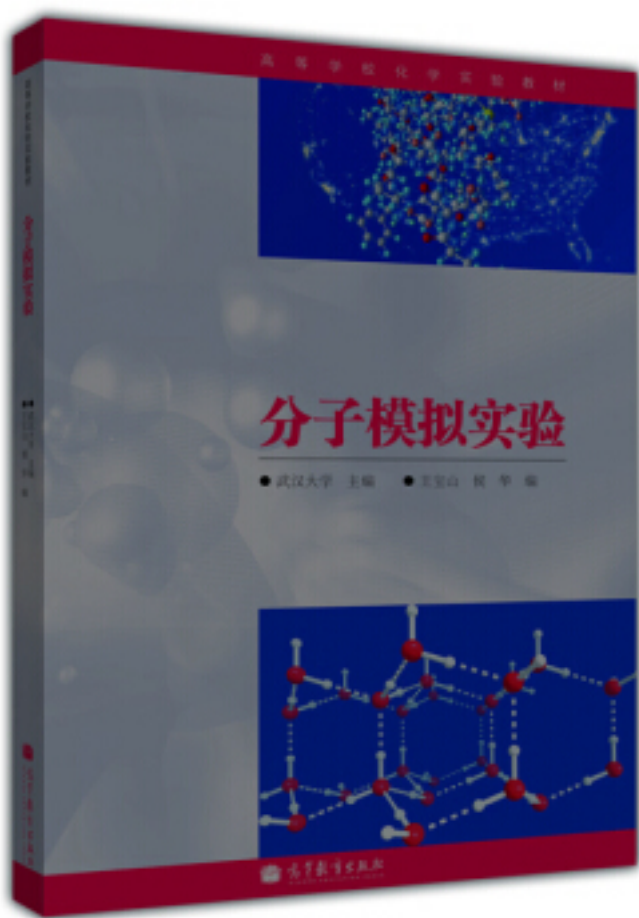


高等学校化学实验教材：分子模拟实验



[高等学校化学实验教材：分子模拟实验_下载链接1](#)

著者:王宝山，侯华 著，武汉大学 编

[高等学校化学实验教材：分子模拟实验_下载链接1](#)

标签

评论

写的内容不够详细 直接参照无法完成

商品很好 很超值 京东值得信任，送货也很快。下次还继续购买

正版书籍。不错。

内容丰富，价格优惠，很好的一本书

不错的一本书，适合用来自学，比较适合初学者

还可以，送来的不慢。

如何使用Chem3D里的量化软件来计算分子的性质，介绍的很详细。只要有软件和电脑，按照书上的介绍，就可以自己完成了。是一本适合于入门者自学的书。我觉得，国内这几年出的同类书里面，这本的实用性最好。

95折价格有点贵！！

很不错哦！！

书很好，很喜欢，快递速度也很快。整体感受很好。

还不错的一本书！！！！

以前没有实验操作，现在好了

习惯用瓶瓶罐罐做实验的，可以看看，了解如何通过计算模拟实验获得分子的结构性能

相当不错 十分满意 下次再买

不错的东西。

很好的，比较全，很方便

好好休息好好

能够对着书进行操作，较好的掌握软件的使用

内容实用，对分子模拟的学者有帮助。

很实用，有chem3d的简明指南

不错，，，，有时间仔细读读。。。。。

定位分子模拟的入门教程，讲解不是很细致，以使用软件为主。

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

《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。近似 Hartree近似及自洽场方法 原子轨道的线性组合近似 近似及方程 1. 2

电子相关模型理论) 组态相互作用模型 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

k

《中华国学经典藏书：晏子春秋》荟萃中华文化精髓，弘扬中华精神文明。轻松阅读国学经典读本，开启智慧

《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。

感觉书不错，送货速度快

教科书，没什么好说的，就那样

化学研究很有比较，前面基础内容略微少了些！

刚做计算的朋友可以参考，有一定价值。

书看起来不错，活动价格可以接受

不错的教材，值得推荐！

书还不错,没仔细看!

这本书对我有帮助,只是有点简单

还没来得及看 应该还行

棒棒哒。

非键相互作用势 (Enon-bonded) NPT系综 (恒温恒压系综) 隐式溶剂化模型
1. 菜单和工具栏区 n 7. 1 p2. 加电荷 r2. 加电荷 s8. 1 9. u1 9. 1
v2. 过渡态的确认 11. z2 生物大分子模拟 第十三章 附录 书评一
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！ Hartre

任何对这一部分内容的概括，都不可避免地要牺牲掉其细节的丰富性，而细节恰恰是这一叙述最可珍视的组成部分。我只想谈谈我感触最深的一点，就是劳动与劳动者疏离、劳动外在于劳动者的现象。调节环工厂15岁的女工陶玉凤手法灵巧，她为胸罩放置衬骨，“她左手的大拇指上戴着一只顶针，每放一副衬骨到松紧布里边的时候，那金属片就会碰得咔嚓作响。咔嚓，咔嚓——那声音有节奏地响着，像是一只节拍器，快得我都数不过来。一个下午，我看着玉凤放完了几千个衬骨……通常情况下，她会连续十个小时放置一个型号的胸罩衬骨。她可以做到不用中断手中的活儿，不用抬头也能回答我的提问”。陶玉凤说道：“说实话，我经常会觉得很平静。一个人干活儿，没有人来打扰我。尤其是我什么也不用考虑。如果我要考虑什么事情，那就做得没有这么快了。所以，我尽量让自己的脑子里面什么也不要想。”对这种工作状态，我们很难说它有多么不好，但我感觉，在这平静里面有某种让人窒息的东西。在当地以临摹欧美绘画出口海外为业的绘画作坊里，海斯勒问女画师：“你喜欢画画吗？”对方斩钉截铁地回答他：“不喜欢，一点都不喜欢。”海斯勒写道：“她从来没有因为兴趣而画过画——当我问她有没有这种可能性时，她看我的眼神好像是我的脑子进了水……我问她，她画的哪一幅画自己最喜欢，她说道：‘我一幅也不喜欢。’我问她有没有崇拜过莫奈或者凡·高这类著名艺术家的作品，她给出了类似的回答。‘没有我最喜欢的作品，’她说道，‘那类作品跟我们现在画的东西没有任何联系。’”再没有什么比这更生动地表现何为“异化”了。对中国现代化进程的种种代价，已有太多讨论，但对人的异化这一代价，我们谈论得还很少。假如人被抽空了，那么现代化的意义究竟在哪里呢？

这本书有一定参考价值。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的使用方法与技术，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。

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的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。

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的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》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。

[illegible]

高等学校化学实验教材：分子模拟实验 下载链接1

书评

[高等学校化学实验教材：分子模拟实验_下载链接1](#)