

中国科普原创经典

走近化学 | ZOUJIN HUAXUE |

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。

化学是这样的一门科学：它为其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

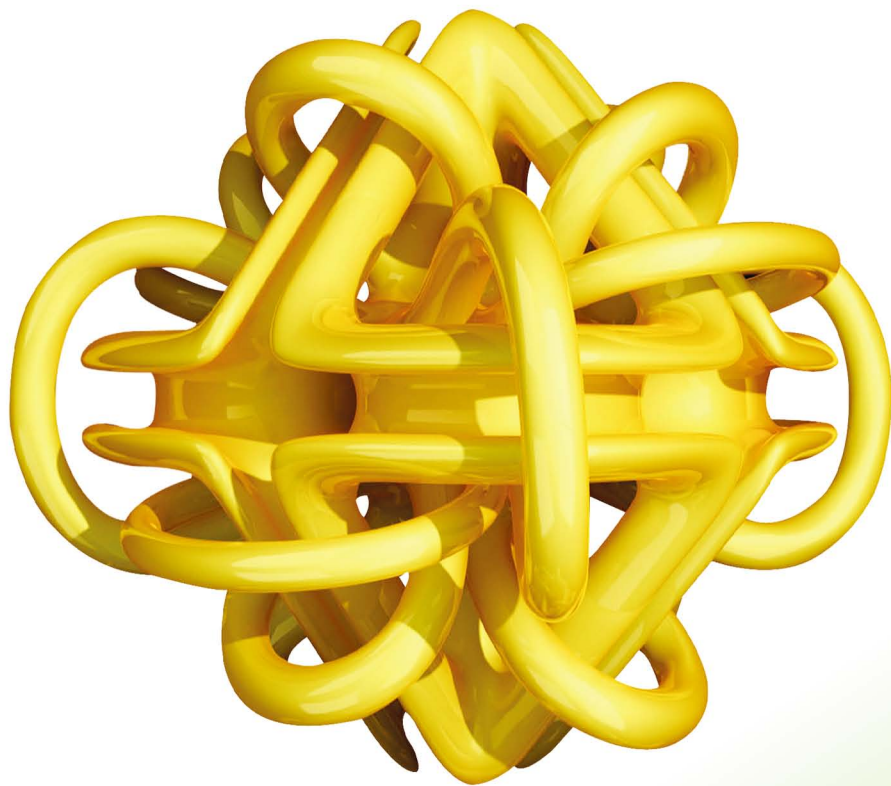
挑战人脑

TIAOZHAN RENNAO

JISUANJI ZAI HUAXUE ZHONG DE YINGYONG

邓勃◎著

——计算机在化学中的应用



CTP 湖南教育出版社

中国科普原创经典

走近化学 | ZOUJIN HUAXUE |

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。

化学是这样的一门科学：它为其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

邓勃◎著

挑战人脑

TIAOZHAN RENNAO
JISUANJI ZAI HUAXUE ZHONG DE YINGYONG

——计算机在化学中的应用

图书在版编目 (CIP) 数据

挑战人脑: 计算机在化学中的应用/邓勃著, —2 版.

—长沙: 湖南教育出版社, 2012. 4

(走近化学/宋心琦主编)

ISBN 978 - 7 - 5355 - 2635 - 9

I. ①挑… II. ①邓… III. ①计算机应用—化学—普及读物 IV. ①06 - 39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 066542 号

丛 书 名 走近化学
书 名 挑战人脑——计算机在化学中的应用
作 者 邓 勃 著
责任编辑 李小娜 阮 林
责任校对 刘 源
出版发行 湖南教育出版社出版发行 (长沙市韶山北路 443 号)
网 址 <http://www.hnepb.com> <http://www.shoulai.cn>
电子邮箱 228411705@qq.com
客 服 电话 0731 - 85486742 QQ 228411705
经 销 湖南省新华书店
印 刷 湖南天闻新华印务邵阳有限公司
开 本 710 × 1000 16 开
印 张 10
字 数 94 000
版 次 2012 年 1 月第 2 版第 1 次印刷
书 号 ISBN 978 - 7 - 5355 - 2635 - 9
定 价 20.00 元

再版说明

20世纪90年代，在新的全球性科学技术发展高潮和随之而来的激烈竞争初现端倪之时，湖南教育出版社的《科学家谈物理》丛书、《科学家谈生物》丛书、《走近化学》丛书陆续出版，在当时为数不多的原创学科科普中，其内容的新颖、作者阵容的强大、语言文字的生动堪称首屈一指。这套学科科普凝聚了当时物理学、生物学、化学领域的大家们的远见卓识和汗水心血。以“大科学家写科普”的严肃认真的态度和细腻别致的情怀，为当时的青少年——21世纪的主人们在接受基础教育的同时，扩展科技视野，了解学科现状和发展趋势提供了一条最权威、最前沿、最贴近的通道。大家们字里行间所流露出来的对科学世界的向往与痴迷、对科学事业的热爱和虔诚也深深地感动和影响了一代青少年。

10 多年之后，我们选择以“中国原创科普经典”的名义再次整理出版这套科普则有着非凡的意义。其一是原创的弥足珍贵。这么多大科学家的学识、思想、精神汇聚于此实属不易，时至今日，这其中的许多人已经离开我们，但他们的所著所言却是具有恒久长远的生命力的，这些原创于今时今日的我们，其珍贵是不言而喻的。其二是经典的不可复制。科学技术的发展日新月异，这套科普所展现的有些内容也许不是如今最前沿的知识，但它所记录的是这个发展过程中不可或缺的一步或几步，它已经成为经典。因此除了将某些符号和计量单位与现在的规定接轨外，我们没有做大的改动，选择尽量保留它的原貌。其三是精神的代代传承。这些著名的科学家们不仅深入浅出地讲解了科普的知识，更自然由衷地表达着对科学的热爱与敬畏，这些精神的甘露润物细无声。我们真心期待 21 世纪的青少年朋友们也能悉心来感受和传承，向伟大的科学和伟大的科学家们致敬。

需要说明的是，时隔多年，有些作者如今已经离世，有些作者现在已经联系不上，但我们一直在努力寻找中。如果有作者或作者的家人、朋友获悉我们再版这套书的情况，请跟我们联系，我们一并付酬致谢。

20 世纪即将过去，日益临近的 21 世纪的脚步声已经清晰可辨。世界各国为迎接新世纪而制定的种种规划即将逐一付诸实施，新的全球性科学技术发展高潮和随之而来的激烈竞争已初见端倪，“山雨欲来风满楼”是世纪之交的科技发展与竞争态势的最佳写照。为了帮助青少年朋友在未来的竞争中迎接挑战，把握机会，继《科学家谈物理》、《科学家谈生物》等丛书之后，湖南教育出版社又推出了一套《走近化学》丛书。这套丛书，对于帮助今天的青少年——21 世纪的主人们在接受基础教育的同时，扩展科技视野，了解化学的现状和发展趋势，明确化学家的任务和责任，是大有裨益的。因此，湖南教育出版社的这一远见卓识，理所当然地得到中国化学界的广泛响应和支持。中国化学会的积极参与和丛书编委会的组成，则保证

了这套科普读物出版计划的顺利实施。

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。它们之间的差别，仅在于元素的种类、原子的数目和原子构建成分子（或构建成晶体等）时方式的不同而已。

化学是这样的一门科学：化学反应，其机理几乎是各有千秋，而且对反应条件又极其敏感，以致对于一些化学现象，人们有时不免众说纷纭，莫衷一是。但是化学反应所遵循的最基本的物理定律，却屈指可数，简单明了。

化学是这样的一门科学：它为其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

化学是这样的一门科学：它和其他学科的相互交叉与渗透日益深化，新的化学分支学科层出不穷，但是化学的理论基础却离不开化学元素论、元素周期律、化学键理论和物质结构理论。

化学是这样的一门科学：除非你已经学会透过宏观现象辨析原子、分子行为的思维方法，并熟悉化学所用的语言和语法规则，否则尽管在实际生活中化学和人的关系是如此的密不可分，可是在很多人的心目中，化学却显得那

么的陌生和遥远，以致有些人在充分享受化学对现代物质文明所作的种种贡献的同时，会不公平地把现代文明社会中的失衡与灾难的责任，归之于化学！

统计资料表明，世界专利发明中有 20% 与化学有关；发达国家从事研究与开发的科技人员中，化学与化工专家占一半左右；化工企业产品的更新换代依靠化学的进步，而化工产品的产值和出口比例在国民经济中一直保持着领先的地位。这些数据足以证明，化学对社会发展和提高人民生活质量具有重要作用。

因此，这套《走近化学》丛书的任务是，通过向广大青少年读者介绍生动有趣的化学现象、引人入胜的化学成就和辽阔无垠的化学前景，消除广大读者对化学的陌生感和因此产生的畏惧心理。作者们在字里行间有意或无意流露出来的对科学世界的痴迷和对科学事业的虔诚，都会引起读者的共鸣。你会和作者一样，产生出一种在知识海洋中遨游时清风拂面、心旷神怡、与大自然融为一体的快感，使自己的聪明才智得到进一步的培育，使自己的志趣得到进一步的提炼和升华。这套丛书取名为“走近化学”，正是呼唤我们向化学走近！

经过三年的努力，《走近化学》丛书的第一辑终于和广大青少年朋友见面了。丛书共分三辑，预计在 2000 年全

部完成。

编委会衷心感谢中科院院士、原中国科学院院长、著名化学家卢嘉锡教授及中科院院士、著名化学家张青莲教授慨允为丛书题词。衷心感谢中科院院士、原中国科学院副院长、著名材料科学家严东生教授代表中国化学会为丛书作序。对湖南教育出版社的领导及担任责任编辑和编委的李小娜、阮林，以及中国化学会的领导及办公室工作人员为丛书所作的指导和支持，在此一并表示谢忱。

亲爱的青少年朋友们，如果这套丛书能够有助于你摆脱常年在题海和应试的桎梏下产生的几丝无奈，为迎接明天而主动地学习，从而使你的生活与学习走向一片更加灿烂与广袤的天地，我们将会感到无比的欣慰。我们坚信，科学可以使人变得更加聪明而坚强，“欲与天公试比高”将是 21 世纪中华青少年的风采！

《走近化学》编委会

(宋心琦执笔)

1997 年 8 月

内容简介

本书简要地介绍了计算机的基本知识，重点介绍了计算机在化学中的应用。全书通过生动的实例说明计算机能帮助化学家解决仅用化学方法难以或不能解决的难题，阐述了计算机的应用对化学发展的重要作用，展示了计算机在化学中广阔的应用前景。本书旨在启迪青少年充分认识学习、掌握和应用计算机的必要性和重要性。

序 言

严东生

由中国化学会和湖南教育出版社共同组织、约请著名化学家撰写的《走近化学》丛书，是我国近年来为满足青少年读者了解化学和学习化学的需要而出版的一套科普丛书。其内容覆盖面之广，作者阵容之强，是多年来罕见的。丛书的选题不仅紧密结合科学技术发展的实际，更着重于作者和读者之间思想和体会的交流。加以文字流畅，内容新颖并富有趣味，我相信它必将成为广大青少年的良师益友。对于有志于从事科学技术工作的青少年，则更有启迪和激励的作用。

21世纪即将来临，目前尚处于发展中国家之列的中国，在未来几十年里世界高新科技的发展与竞争中，将面临极其严峻的挑战。化学不仅会和其他学科一样，保持着自20世纪50年代以来的迅猛发展势头，而且和生命、信息、材料与环境等科技领域的相互渗透也会日益

深入。了解化学和应用化学的水平将对社会生产力的发展和人民生活质量的提高起着关键的作用，化学基础知识也将成为充实新世纪公民基本素质的重要内容之一。因此，《走近化学》丛书的问世所起到的积极作用，一定会得到社会各界的支持和肯定，也一定会受到广大青少年读者的欢迎。

《走近化学》丛书涉及现代化学的多个侧面，介绍了人们在这些领域内的最新成就，反映了作者对该领域未来发展的精辟见解。它有利于广大青少年读者开阔视野，激起他们对科学技术的兴趣，提高他们对科学技术推动社会发展的重要作用的认知。对于有志于从事科学技术工作的青少年读者则更能起到启蒙的作用。当然，科学技术事业的发展，要依靠千百万科学技术人员的辛勤劳动与杰出科学家的殚精竭虑和艰苦实践，不可能一蹴而就。我们应当从丛书所展示的前辈科学家所经历过的失败与成功的史实中吸取经验与教训，以增强我们积极参与国际科学技术领域竞争的信心和力量。

光阴荏苒，岁月蹉跎，在新的世纪里，振兴中华、造福人类的历史责任已无可推卸地落在今天青少年一代的肩上。年轻的朋友们，先进的科学技术像明日的朝阳一样，将由你们用双手高高托起！

1997年9月

前 言



电子计算机的诞生是 20 世纪人类最伟大的发明创造之一，是科学技术发展史上的里程碑。电子计算机的广泛应用，极大地改变了人类的生产劳动、生活方式和精神文化生活的面貌。计算机的应用遍及各个学科，成为推动科学发展的强大武器，它在计算、信息处理、过程实时控制、辅助技术（辅助设计、辅助合成、辅助诊断、辅助教学等）、人工智能等各个方面都发挥着巨大的作用。电子计算机进入千家万户，大大丰富了人们的生活。

计算机是人脑功能的延伸，能帮助化学家解决过去仅用单纯化学方法难以解决的许多问题，成为化学工作者得力的助手。计算机应用遍及化学的各个领域，从最早用于科学计算到建立化学专家系统，进行分子结构的解析和分子设计，大大节省了人力物力，大大提高了工作效率和质量。详细历数计算机在化学中的应用，透彻地阐述计算机对化学发展的重要性，既不是本书的任务，亦非作者能力之所及。本

书仅以计算机在化学中应用的若干实例来说明计算机的的确确可以帮助化学工作者解决许多各式各样的问题，化学工作者如果能熟练地应用计算机，便“如虎添翼”，对工作大有益处。如果本书有助于青少年朋友产生学习计算机的兴趣，进而努力去掌握计算机技术，在自己的工作中力图积极地去应用它，作者将为此而感到十分的欣慰，这也正是作者所衷心期望的。

电子计算机是一门新兴学科，发展迅速，内容更新极快，加之作者本人学识有限，对计算机涉足不深，书中欠妥之处在所难免，恳请各位专家和读者批评指正，本人将十分感谢。

目录

走近化学 · 挑战人脑

前言 / 001

1 精巧的算盘和神奇的计算机 / 001

- 1.1 巧妙的计算方法 / 001
- 1.2 精巧的运算工具 / 003
- 1.3 电子计算机的出现 / 005
- 1.4 电子计算机的结构和功能 / 007
- 1.5 电子计算机的特点 / 010
- 1.6 计算机为什么采用二进制编码 / 011
- 1.7 计算机在化学中的应用 / 013

2 快速、高效的计算机文献检索 / 015

- 2.1 见多才能识广 / 015
- 2.2 “文献爆炸”和“大海捞针” / 016
- 2.3 计算机检索文献的优点 / 018

2.4 计算机怎样完成检索 / 020

3 诲人不倦的计算机教师 / 024

3.1 传播知识工具的又一次飞跃 / 024

3.2 计算机怎样当老师 / 026

3.3 形象化的计算机模拟化学实验 / 030

3.4 智能型计算机辅助教学 / 032

4 理想和追求——最优化 / 035

4.1 如何最快地爬到山的最高峰 / 035

4.2 做实验的学问——科学设计实验 / 036

4.3 奇妙的表格——均匀实验设计 / 042

4.4 在运动中寻优——单纯形优化法 / 045

4.5 退火的启示——模拟退火算法 / 049

4.6 优胜劣汰——遗传优化法 / 052

5 计算机辅助合成路线设计 / 055

5.1 传统的有机合成——合成的艺术 / 055

- 5.2 计算机辅助——合成的革命 / 057
- 5.3 全新分子设计——发展前景诱人 / 060
- 5.4 合理药物分子设计——健康的福音 / 062
- 5.5 高分子设计——功能材料的开发 / 064

6 模式识别——人类的慧眼 / 066

- 6.1 神奇的“眼睛” / 066
- 6.2 丹炉炼金睛——识别模型的建立 / 068
- 6.3 计算机品尝家 / 071
- 6.4 打假的能手 / 075
- 6.5 计算机勘探员 / 077
- 6.6 癌症可以早期诊断吗 / 079
- 6.7 模式识别辅助筛选催化剂 / 079
- 6.8 谁是罪犯 / 082
- 6.9 污染从何而来 / 083

7 有机分子结构解析 / 086

- 7.1 有机结构理论的建立 / 086