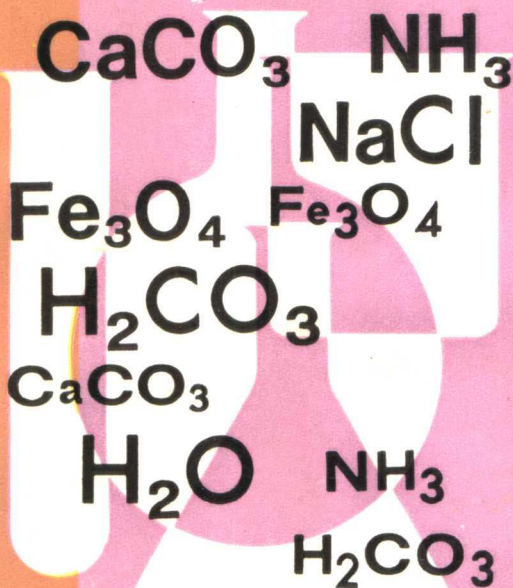


电脑和化学

中学生文库

CHONGXUESHENG WENKU



上海教育出版社

苏工业学院图书馆
藏书章

中学生文库



ZHONGXUESHENG WENKU

电脑和化学

徐建成 唐新农

上海教育出版社

责任编辑 张文杰
封面设计 范一辛

中学生文库 电脑和化学

徐建成 唐新农

上海教育出版社出版
(上海永福路123号)

本书由上海发行所发行 上海市印刷三厂印刷

开本 787×1092 1/32 印张 6.375 插页 2 字数 133,000

1986年10月第1版 1986年10月第1次印刷

印数 1—9,900本

统一书号: 7150·3580 定价: 1.00元



第一章	BASIC 程序结构和输出语句	1
第一节	初步知识	1
第二节	输出语句和输出格式	6
第二章	提供数据的语句	10
第一节	常数和变量	10
第二节	提供数据的语句	11
第三章	转向语句和数组	18
第一节	转向语句	18
第二节	转子语句、返回语句和暂停语句	24
第三节	循环语句	26
第四节	多重循环、数组和下标变量	29
第四章	电脑的逻辑运算和化学平衡移动	34
第一节	电脑的逻辑运算	34
第二节	化学平衡和勒沙特列原理	37
第三节	程序流程	39
第四节	框图	40
第五节	程序清单和解释	42
第六节	运行情况	53
第五章	摩尔的计算和 INT(X)、RND	

(X) 函数	57
第一节 摩尔的定义	57
第二节 INT(X) 和 RND(X) 函数	62
第三节 控制转向语句	65
第四节 程序运行示意图和设计思想	68
第五节 程序清单和主程序讲解	70
第六节 子程序和程序运行情况	79
第六章 配平化学方程式和字符	
串数组	84
第一节 配平化学方程式的要求和方法	84
第二节 字符串下标变量和数组	87
第三节 程序运行流程和设计思想	89
第四节 子程序-1 的框图 and 解释	91
第五节 程序清单 and 解释	93
第六节 部分运行介绍	101
第七章 有关溶液的计算和跟踪语句	103
第一节 有关溶液的概念和计算	103
第二节 跟踪语句	106
第三节 程序清单 and 解释	107
第四节 部分运行情况	113
第八章 打印表格和有关原子组成的	
计算	116
第一节 打印表格	116
第二节 有关化学知识和流程示意图	118
第三节 程序清单和部分运行情况	123

第九章	化学基本概念和使表格内容变化的程序	132
第一节	一些基本概念	132
第二节	怎样使表格内容变化	135
第三节	使程序层次清楚、结构清晰	137
第四节	程序清单和部分运行情况	142
第十章	组合练习程序	154
第一节	程序设计思想和特点	154
第二节	部分运行情况	156
第三节	程序清单和说明	159
第十一章	电脑和化学	181
第一节	电脑和中学化学	181
第二节	由电脑配平化学方程式	183
第三节	电脑和量子化学、应用化学	196

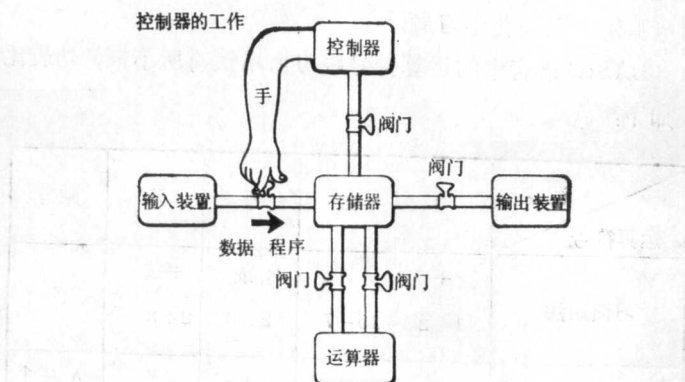


第一章 BASIC 程序结构和输出语句

第一节 初步知识

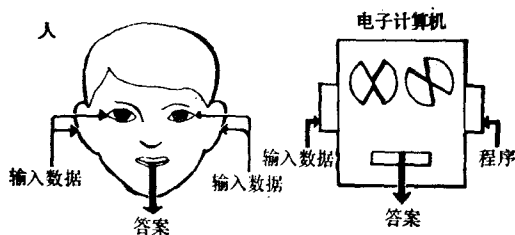
一 硬设备和软设备 一部电脑的硬设备包括:

(1) 主机 主机由控制器、运算器和存储器构成, 是电脑的核心部分, 它有运算, 判断和记忆功能, 并指挥其他设备协调工作。



(2) 输入设备 指令或数据通过输入设备送入电脑。常用的是键盘。

(3) 输出设备 程序运行结果必须通过输出设备显示出来。常用的有终端显示器, 打印机等。



软设备:

要电脑正常工作和发挥效能, 除了需要以上硬设备外, 还需要功能完善的程序系统(软设备), 使计算机自动按各种要求工作。BASIC 语言就是一种简单易学、通用性强的程序语言, 它有人机对话的功能, 使用非常方便。本书结合中学里普遍使用的苹果 II 型(APPLE-II)机, 介绍 BASIC 语言, 并且用电脑解一系列化学习题。

BASIC 语言中的运算符跟习惯用法有所不同, 列表比较如下:

运 算 运算符	加	减	乘	除	乘方
习惯用法	+	-	× 或 ·	÷ 或 -	2^5
	1+2	15-7	2×3	2÷3, $\frac{2}{3}$	
BASIC 语言用法	+	-	*	/	^ 或 ↑
	1+2	15-7	2*3	2/3	或 ** $2 \wedge 5$

下表是 BASIC 语言的标准函数:

标准函数	功 能	说 明
SIN(X)	$\sin x$	自变量 x 单位为弧度
COS(X)	$\cos x$	
TAN(X)	$\operatorname{tg} x$	
ATN(X)	$\operatorname{arctg} x$	函数值单位为弧度
LOG(X)	$\log_e x$	$x > 0$, $\lg x$ 用 LOG(X)/LOG(10) 表示
EXP(X)	e^x	
SQR(X)	$\sqrt{x}$	$x \geq 0$
ABS(X)	$ x $	
SGN(X)	求 x 的符号	$\operatorname{SGN}(X) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x > 0 \\ 0 & \text{当 } x = 0 \\ -1 & \text{当 } x < 0 \end{cases}$
INT(X)	求不大于 x 的最大整数	
RND(X)	产生一个 0 和 1 之间的随机数	

BASIC 语言运算先后次序为:



二 直接运算 使用 PRINT 命令, 可以直接运算一些较简单的题目, 就象使用电子计算器一样。

〔例 1〕 计算一氧化碳分子量

碳和氧的原子量分别是 12 和 16, 在键盘上逐字打入 PRINT12+16 后再按 RETURN 键, 屏幕上立即出现如下结果:

PRINT 12+16

28

PRINT 12+16 就是输出 12+16 的运算结果。RETURN 是回车换行键, 一条 BASIC 命令必须以 RETURN 结束。有的电脑以 ↵、ENTER 等键代替 RETURN 键, 为了书写方便, 我们在后面一律用“↵”代表回车换行键。

PRINT 前的“)”是电脑已作好准备的提示符, 任何一条 BASIC 命令应该在提示符“)”后打入。

〔例 2〕 计算原子核外第三电子层(M 层) 最多可容纳的电子数。因为 M 层最多可容纳 2×3^2 个电子。在键盘上逐字打入 PRINT 2*3^2↵ 屏幕上即出现:

PRINT 2*3^2

18

〔例 3〕 计算氢氧化钙的分子量。

打入 PRINT 40+(16+1)*2↵ 屏幕显示

PRINT 40+(16+1)*2

74

钙的原子量是 40, 键盘上以“φ”代表“0”, 避免与英文字母“O”混淆。

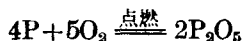
〔例 4〕 已知 20°C 时氢氰酸的电离常数为 7×10^{-10} , 求 0.05 M 溶液中氢氰酸(HCN)的电离度。

因为电离度 $\alpha = \sqrt{\frac{7 \times 10^{-10}}{0.05}}$, 开方运算可以用标准函数 SQR(X), 7×10^{-10} 在 BASIC 语言中用 7E-10 表示, 所以用电脑直接运算:

PRINT SQR(7E-10/0.05)

1.18321596E-04

〔例5〕 多少克磷在氧气里燃烧, 才能生成 142 克五氧化二磷?



列比例式: $4 \times 31 : 2 \times (2 \times 31 + 5 \times 16) = x : 142$ x 是磷燃烧的克数。

$$x = \frac{4 \times 31 \times 142}{2 \times (2 \times 31 + 5 \times 16)}$$

用电脑计算:

```
]PRINT 4*31*142/(2*(2*31+5*16))
```

62

BASIC 语言对括号无大小之分, 一律用()。括号可以套用, 但最多不能超过 34 层。

三 BASIC 程序结构

```
10 PRINT 12+16
```

```
20 END
```

这是一个最简单的 BASIC 程序, 它由 10 语句和 20 语句组成。10、20 称为语句标号或行号, 行号必须是 0~63999 之间的整数。一语句行最多可输入 255 个字符, 包括行号和空格。20 语句是结束语句(END 语句), 每个程序至少有一个 END 语句, 程序运行到此便自动停止。

怎样输入和运行一个程序呢? 如果电脑已接通并显示“]”后就先打入 NEW↵, 清除电脑原先存有的程序, 然后逐字打入你的程序, 每一语句行最后要按“↵”键。

```
10 PRINT 12+16↵
```

```
20 END↵
```

这样程序就存入电脑, 再打入 RUN↵, 电脑便按语句顺序执行程序中各条语句, 屏幕显示:

]RUN

28

带有行号的命令是间接命令，在打入 10 PRINT 12+16
✓ 语句后电脑并没有马上执行这一命令。而 PRINT 12+16
✓ 不带行号，电脑立即执行，这样的命令叫直接命令或键盘命令。“NEW”、“RUN”都是直接命令，“LIST”也是一条直接命令，它的作用是列出电脑现存的程序。

第二节 输出语句和输出格式

一 PRINT 语句的作用:

[例 1]

```
10 PRINT 2
20 PRINT SQR(2)
30 END
```

]RUN

2

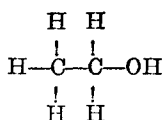
1.41421356

PRINT 语句可以先对表达式运算，再输出运算结果。常数作为表达式的特殊情况，也可以用 PRINT 语句直接输出。

[例 2]

```
10 PRINT"__H__H"
20 PRINT"__!__!"
30 PRINT"H—C—C—OH"
40 PRINT"__!__!"
50 PRINT"__H__H"
60 END
```

]RUN



运行这个程序，得到乙醇(酒精)的结构式。双引号内的字母、符号(包括空格)称为字符串。PRINT 语句可以将字符串按原样显示或打印出来，但双引号是字符串的起止标志，它不能通过 PRINT 语句输出。

“ ”表示一个空格，输入时按一下空格键，输出时会空开一格。

[例 3]

```

.....
40 PRINT A, B
50 PRINT A+B

```

这里 A, B 代表不同的变量。PRINT 语句可以输出变量和含有变量的表达式的值。

二 PRINT 语句的输出格式

[例 4]

```

10 PRINT "Hydrogen", "H", 1
20 PRINT "Chlorine", "Cl", 35.5
30 PRINT " ", "HCl", 1+35.5
40 END

```

]RUN

Hydrogen	H	1
Chlorine	Cl	35.5
	HCl	36.5

APPLE-II 机显示器每行有 40 个字符，PRINT 语句各

项间如果以逗号相隔,就按标准格式输出,每一行被分成三个标准区段,它们的起始位置分别是第 1, 17, 33 格。

[例 5]

```
10 PRINT "H: "; 1
20 PRINT "Cl: "; 35.5
30 PRINT "HCl: "; 1+35.5
40 END
```

这个程序中各项以分号分隔,电脑按紧凑格式输出。

```
]RUN
H: 1
Cl: 35.5
HCl: 36.5
```

[例 6]

```
10 PRINT "K_"; "Ca_"; "Na_"; "Mg_";
    "Al_";
20 PRINT "Zn_"; "Fe_"; "Sn_"; "Pb_";
    "H_";
30 PRINT "Cu_"; "Hg_"; "Ag_"; "Pt_"
    ; "Au"
40 END
```

```
]RUN
```

K Ca Na Mg Al Zn Fe Sn Pb H Cu Hg Ag Pt Au

前面五个例子中, PRINT 语句的最后没有任何标点符号,电脑输出后,显示器(或打印机)会自动换行。例 6 中 10、20 语句最后以分号结束,在输出 10, 20 语句各项后不换行,按紧凑格式紧接着输出下一个 PRINT 语句中的各项。如果 PRINT 语句最后以逗号结束,则不换行,按标准格式输出下

一条 PRINT 语句中的各项。

PRINT 语句后如果没有任何输出项，则执行一次换行。

〔例 7〕

```
10 PRINT TAB(3); "H"; TAB(5); "H"
20 PRINT TAB(3); "!"; TAB(5); "!"
30 PRINT "H—C—C—OH"
40 PRINT TAB(3); "!"; TAB(5); "!"
50 PRINT TAB(3); "H"; TAB(5); "H"
60 END
```

TAB(X)是输出格式函数，它只能用在 PRINT 语句中，与输出项之间用分号隔开。TAB(X)函数命令打印机或显示器的字头打在 X 值所指的位置上。当 X 值带有小数时，TAB(X)自动取 X 的整数部分。

例 7 的作用和例 2 完全一样，但例 2 的定位是借助空格键来实现的。还可以用 SPC(X)函数输出空格，如 10 语句可以改为：

```
10 PRINT SPC(2); "H"; SPC(1); "H"
```

PRINT 语句输出的各项，一般通过屏幕显示，如果要打印机打印出来，还要用“PR#1”命令连接打印机，这样 PRINT 语句中的各输出项就能打印出来。在打印结束时，用“PR#0”来断开打印机。有的电脑则以“LPRINT”作为打印命令，而“PRINT”为屏幕显示专用。下面我们只用显示器作为输出设备。



第二章 提供数据的语句

第一节 常数和变量

一 常数 在 **BASIC** 语言中数有两种表示方法 (1) 普通记数法: 如 22.4, -126.57 等。(2) 科学记数法, 如阿佛加德罗常数 6.022×10^{23} , 用 6.022E+23 表示。一个碳原子的质量 1.994×10^{-23} (克), 用 1.994E-23 表示。如果数字的绝对值超过 1.70141×10^{38} , 电脑将作出错处理, 绝对值小于 $2.938734876 \times 10^{-39}$ 则作 0 处理。

二 变量 变量分为简单变量与下标变量, 它们又各有三种形式: 实型, 整型, 串型。实型简单变量代表实数, 可以用一个大写英文字母表示如 A, 或一个大写字母后面跟一个 0 至 9 的阿拉伯数字表示如 X1, 还可以用两个大写字母表示如 OA。整型简单变量只是在实型简单变量后面加 %, 如 B%、D0%, 它只代表整数。串型简单变量用来代表字符串, 又称字符串变量, 在实型简单变量后加 \$ 表示, 如 A\$, G1\$。从下面表格可以看出各种变量之间的联系和区别。

	实型	整型	串型
简单变量	A1, C	A1%, C%	A1\$, C\$
下标变量	A1(5), C(2, 3)	A1%(5), C%(2,3)	A1\$(5), C\$(2,3)

下标变量在第三章再作具体介绍。

变量必须先赋值,才能参加运算。

第二节 提供数据的语句

一 赋值语句

〔例 1〕

```
10 LET N=14
20 PRINT N
30 END
```

10 语句是赋值语句。“LET”是定义符,“=”是赋值号,它的意思是将赋值号右边的数值赋给左边的变量。LET 也可省去不写(成为 10 N=14)。20 语句输出变量 N 的值。运行这个程序,屏幕显示:

```
]RUN
14
```

〔例 2〕

```
10 LET H=1
20 LET K=H
30 PRINT H, K
40 END
```

```
]RUN
```

```
1 1
```