



计算机化学化工丛书

Computer, Chemistry and Chemical Engineering Series

计算机 在化学化工中的应用技术

赵文元 王亦军 编著

科学出版社

计算机化学化工丛书

计算机在化学化工中的应用技术

赵文元 王亦军 编著

科学出版社

2001

内 容 简 介

本书为《计算机化学化工丛书》之一。

本书是一本介绍计算机在化学化工领域中的应用技术型图书。以实用性为特点,为了让读者了解和掌握计算机在化学化工中的实用技术,作者详细介绍了计算机网络技术、模拟技术、智能化技术等,在计算化学、化学教学、实验管理及其他化学化工领域中的应用。

本书不仅适用于从事化学化工领域的教学、科研工作者和高校学生及研究生,也对一般化学化工从业人员有重要的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在化学化工中的应用技术/赵文元,王亦军编著. -北京:科学出版社,2001

(计算机化学化工丛书/许志宏主编)

ISBN 7-03-009214-7

I. 计… II. ①赵…②王… III. ①计算机应用-化学②计算机应用-化学工业 IV. ①O6-39②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 06966 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2001年7月第一版 开本:850×1168 1/32

2001年7月第一次印刷 印张:12 3/4

印数:1—4 000 字数:329 000

定价:30.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈北燕〉)

《计算机化学化工丛书》

编 委 会

主 编 许志宏

副主编 杨小震

编 委 (以姓氏笔画为序)

马沛生	王淀佐	王夔	许禄
李科	来鲁华	陈丙珍	陈冀胜
陈凯先	陈念贻	陈敏伯	陈维明
杨友麒	严新建	林少凡	郑崇直
周家驹	胡鑫尧	俞汝勤	郭传杰
郭力	袁身刚	麻德贤	惠永正
潘忠孝			

《计算机化学化工丛书》序

化学化工是信息量特别大的一门学科。到 2000 年 4 月底，在 CAS 录的化学物质约 2400 万种，它们的各种性质加上多元体学的性质，可以说是一个无边无际的数据海洋。于是，化学数据库的建设就成为 20 世纪后 20 年国际上的一件大事。中国科学院从 1979 年开始建设化学数据库，迄今已经整整 20 年。其学院从 1979 年开始建设化学数据库，迄今已经整整 20 年。其间，多次得到国家和中国科学院的奖励。

长期以来，人们不仅希望能定性地掌握而且希望能定量地了解化学化工学科的规律，而计算机的能力及相关技术高速发展，正在帮助人们一步一步地实现着这个愿望。从理论化学的计算、谱图解析、化学计量学、化工过程模拟、热力学的复杂计算，都在计算机的帮助下得到了很大的发展。

上述基础工作作为化学化工领域的工作者增加了很大的自由度：可以用计算机帮助对化合物的谱图解析，帮助选择合成路线，帮助进行药物分子设计，可以进行新过程、新技术的开发，可以进行大型工业装置的设计，可以对工厂的生产过程进行优化，……等等。

在改革开放的 20 年里，我们的计算机化学从无到有，形居了一支生机勃勃的研究队伍，也形成了一个很大的用户和读者群体。到 21 世纪，这个群体更需要有能力利用计算机帮助自己的工作，所以本套丛书中也包含一些计算机化学化工的教材，以利于化学化工本科生和研究生的培养和工程人员自学。

所以，我们希望通过本套丛书介绍一些解决问题的方法，帮助读者在遇到问题时，知道如何去解决问题。为此，要求作者在自己的著作中，要给出软件、数据的出处、网络地址或光盘。时

代发展得很快，仅做到这一点显然还是不够的。我们特别注意到近年来，Internet 网络的高速发展已经给我们的时代带来了巨大变化。到 1999 年 7 月，Internet 已经是一个连接 5600 多万个节点的一个网络系统，它上面的文本信息已经超过 600 亿字节。这些信息一个最大的长处是时间的滞后最少，易于通过计算机获取。

如果能将科学数据库在网上的功能，由数据的存取扩大到运算、绘图、模拟等多方面，必将极大地推动科学数据库工作的发展和广泛使用。在 21 世纪，将逐步可以做到，人们在用户端将数据从库中取出，在服务器端程序系统上计算，结果以图形或多媒体方式输出到用户端。据了解，我们有些作者在自己的工作中已经能够在网上实现数据查询、计算、绘图、三维图形显示等。

进入 21 世纪，Internet 网络系统的应用将更加普及，Internet 网络的客户/服务器的应用将进入千家万户，进入教室和办公室的各个角落。所以，如果能将科学数据库和计算程序库在网络服务器上实现，那么它的普及应用，将会随着计算机网络的推广而推广。

如果有的作者，目前仅能给出单机版本的软件，也欢迎他们能再作一点工作，很快能达到上网服务的目的。相信进入 21 世纪不久，在放户上人们就有可能逐步享受到多种媒体的全方位的科学信息的服务。

这套丛书是我国多位化学化工学科的专家、教授、学者多年辛勤劳动的成果，也是科学出版社、国家自然科学基金委员会优秀研究成果专著出版基金和中国科学院科学出版社基金大力支持的产物，希望它的出版能促进我国 21 世纪计算机化学化工学科的发展，并有助于相关学科发展。

《计算机化学化工丛书》编委会

2000 年 5 月

前 言

这是一本写给普通化学化工工作者的书。我们很早就萌生了这样一种想法：写一本关于如何应用计算机技术解决化学化工问题的书。因为随着计算机在各个领域中的普及，很多学生和同事经常讲起：“计算机除了能够做文字处理、电子报表、数值计算和图形绘制等通用功能以外，在化学化工领域还能够做些什么？”很显然，在计算机大行其道的今天，如何利用计算机技术解决化学化工问题，在大学化学化工专业教学中还没有得到很好地解决，估计在化学化工的其他领域的情况也差不多。虽然各种各样的有关计算机知识培训班铺天盖地，但是惟独很少见到培训用计算机解决化学问题的。是化学不需要计算机技术？显然不是。既然如此，让化学化工专业的学生和工作在化学领域内的科学工作者了解和掌握计算机在化学化工中的应用技术则构成本书的主要目的。

有人称 21 世纪是信息世纪，是计算机世纪，可见计算机技术在 21 世纪的重要性。众所周知，20 世纪人类最重大的发明莫过于电子计算机。经过近半个世纪的发展，计算机几乎改变了人类社会的一切。从日常生活中的通讯工具，如常见的电话，已经从过去继电器式演变成目前计算机控制的程控式，家用电器、自动照相机、摄像机内加入了程序控制芯片，甚至正规的电子计算机也堂而皇之地占据了家用电器的一块位置。人们写文章不再必须使用传统的笔和纸，购物消费可以不再需要到商场，人们远距离交流已经不再限于写信，上学可以不必到学校，甚至工作可以不必到单位，这些都应归功于现代计算机技术的发展。可以讲，计算机对现代人类生活的影响是全方位的。

同样，对于化学工作者来说都不能回避这样一个现实：在化

学领域中量子化学的从头计算已经成为人们认识分子结构的强有力理论武器。计算机化的大型分析测试仪器，如傅里叶快速变换的红外、核磁共振、质谱、能谱、X射线衍射等仪器，由于计算机技术的运用使其性能和应用领域大大扩展。借助于计算机进行非常复杂的数据处理和实验设计，使工作效率成百倍提高。借助于计算机人们可以进行分子设计(诺贝尔化学奖得主、美国化学家 Elias James Corey 建立了基于计算机的 LHASA 分子设计系统)和自动化合成复杂蛋白质(根据美国化学家 R. Bruce Merrifield 发明的固相合成法)。使用计算机人们可以进行实验室的自动化管理，可以绘制出精确美观的实验装置和曲线，可以写出规范漂亮的科技论文，可以通过计算机网络直接获得第一手科技信息。计算机使化工设备自动化，提高了生产效率和可靠性。利用计算机模拟技术模拟化学化工过程，改变了传统的化学研究方法。计算机智能技术创造出化学各个领域的专家系统。凡此种种足可说明计算机对化学化工工作者的重要程度。

在计算机技术发展的同时，化学学科也在加速发展，对计算机的需求也更加迫切。主要表现在：① 化学计算的难度越来越高，许多结构化学和物理化学中的问题离开了计算机便不能获得圆满解决；② 化工设备和工艺对自动化的要求越来越高，而且对许多化工过程，人工进行控制已经相当困难，需要高可靠性的控制系统；③ 化学和化工实验研究的高费用和高风险性质也驱使人们探讨利用计算机模拟技术部分代替实际的化学和化工实验，以降低研究成本和减少风险。从上述分析我们可以看出，化学学科中复杂计算对强大计算能力的依赖性，庞大化学信息量对存储和整理能力的高要求，化工过程对自动化的需求与计算机技术的关系都要求新一代的化学工作者掌握现代计算机技术，特别是计算机在化学中的特殊应用技术。在这种形势下，驾驭计算机的能力已经成为衡量包括化学家在内的所有科学工作者能力的重要尺度之一。计算机技术的快速发展在给我们带来机遇的同时，也向每一位化学家提出了挑战，这就是如何掌握驾驭计算机的本领来解决

化学问题。不懂得如何应用计算机技术的化学工作者难以称其为 21 世纪的合格化学家。然而我国高校的化学化工专业教育体系还不能说已经适应了计算机时代的要求。目前在普通高等学校化学和化工专业中虽然都先后开设了计算机文化基础和计算机应用基础课程,但是对计算机技术在化学化工中的应用知识和技术讲授却普遍没有受到应有的重视。其中一个重要原因是没有合适的教材。在计算机类图书堆满书店的同时,却很难发现一本写给化学工作者的。编写一本将现代计算机技术应用于化学领域的教材或实用参考书,应该说是当务之急。

本书是一本应用型书籍,重点不在阐释计算机应用理论和分析软件结构,而在强调内容的实用性,以满足本书主要读者群——非计算机专业的化学工作者——的实际需要。目前在大学的各个学科普遍开设计算机文化基础和计算机应用基础课程,其内容已经涵盖硬件基本知识、基本操作系统、常用软件的使用和基本程序语言基础等方面,因此上述内容不在本书的介绍范围之内。此外,作为本书读者对象的化学工作者理应熟练掌握本领域内的化学知识,或者应该从其他课程获得它们,这部分也不作为本书的内容,涉及的相关理论和知识,需要在其他化学类书内解决。本书假定读者已经具备了上述基本知识和技能,在此基础上进一步学习掌握计算机在化学领域中的具体应用技术和相关知识。

本书主要有以下 3 个目标:① 使化学化工专业的学生和化学工作者了解计算机在化学中应用的现状和发展趋势,知道自己现在和将要从事的化学领域中应当掌握哪些计算机技术;② 通过本书的学习引导,使他们初步掌握一些计算机应用方面的入门知识,在涉足开拓计算机在化学中应用这个新领域时能比较轻松;③ 希望通过本书介绍的计算机应用技术和软件,提高化学工作者从事化学领域工作的效率和水平。

本书共分 9 章,第一章至第五章、第九章由赵文元执笔,第六章至第八章由王亦军执笔,全书由赵文元校订。

本书中的部分内容曾在我校材料专业硕士研究生同名课程中

使用，受到学生的欢迎。书中给出的应用例子和编写的程序在计算机上运行过。书中介绍的软件有部分是商业性软件，更多的是某些大学或机构提供的共享免费软件，欢迎读者与我们共同交流。

作为一名化学工作者，深知撰写这样一本计算机技术与化学知识相结合的书籍的种种困难。好在有广大学生和同仁的支持与鼓励，终于鼓足勇气完成了本书的撰写工作。由于作者水平和专业知识所限，错漏在所难免，真诚欢迎专家学者和广大读者批评指正。

作 者

2000年11月于青岛大学



目 录

第一章 计算机在化学中的应用概述	1
1.1 计算机技术在化学中应用的发展历史	1
1.2 计算机技术在化学中应用的主要领域	6
1.3 计算机技术在化学中应用的现状	9
1.4 计算机技术在化学中应用的发展趋势.....	13
思考题	17
第二章 计算机网络技术在化学中的应用	19
2.1 计算机网络基本知识.....	19
2.1.1 有关计算机网络技术的一些概念	20
2.1.2 计算机互联网络结构	24
2.1.3 计算机互联网的功能和应用领域	25
2.1.4 计算机网络的使用方法	28
2.1.5 计算机网络的化学功能	30
2.2 Internet 上的化学化工信息资源	31
2.2.1 计算机网络化学数据库	33
2.2.2 在计算机互联网上进行文献检索	36
2.3 网上化学化工信息资源的搜索.....	38
2.3.1 通过 Internet 搜索引擎查找化学化工信息	39
2.3.2 通过专业化学网站查找化学信息	40
2.3.3 通过指导性书籍查找	43
2.4 网上主要化学信息资源简介.....	43
2.4.1 STN 数据库简介	43
2.4.2 DIALOG 数据库简介.....	50
2.4.3 美国科学信息研究所 ISINET	56

2.4.4	万方数据库简介	59
2.4.5	国家图书馆网上图书馆简介	67
2.5	互联网上计算资源的利用	71
2.5.1	计算化学的内容和方法	71
2.5.2	利用计算机网络远程登录进行化学计算	72
2.6	计算机远程化学教学应用	76
2.6.1	概述	76
2.6.2	计算机网络化教学的形式和内容	78
2.6.3	常见计算机网络课件资源	81
	参考文献	84
	思考题	84
	附录一 美国化学文摘(CA)网上数据库简介	85
	附录二 STN international 操作中不可作为检索因素的 Stopwords	87
第三章	计算机在计算化学中的应用	88
3.1	计算机程序的基本编制过程	89
3.1.1	计算机程序的基本结构和编制过程	89
3.1.2	BASIC 程序的基本指令集介绍	90
3.2	常见化学数值计算程序编制方法	91
3.2.1	气体分子平均自由程计算	93
3.2.2	分子组成计算	94
3.2.3	线性回归方程的计算	97
3.2.4	X 射线衍射 Bragg's 角计算	101
3.3	非数值处理编程方法	106
3.3.1	复杂反应动力学微分方程程序	107
3.3.2	共聚物的连结次序模拟	115
3.4	计算机图形化表达编程方法	118
3.4.1	图形化线性回归方程	120
3.4.2	反应动力学微分方程的图形化表达	127
3.4.3	三维图形的显示程序	132

3.5 其他常用化学计算程序简介	139
3.5.1 实验数据收集与处理程序	139
3.5.2 弱酸 pH 值的计算	143
3.5.3 根据高分辨质谱数据计算分子元素组成	145
参考文献	147
练习题	148
附录 QBasic 语句和函数表	148
第四章 计算机图形化技术在化学中的应用	157
4.1 化学结构的图形化表述软件	160
4.1.1 ISIS/Draw 软件	162
4.1.2 ChemSketch 软件	179
4.1.3 Chemwindow 软件	184
4.2 计算机辅助建立分子结构模型	188
4.2.1 概述	188
4.2.2 Weblab-ViewerPro 3.2 分子模型演示软件	192
4.2.3 Alchemy 类分子模型软件	206
思考题	213
练习题	213
第五章 计算机在结构化学计算和化学过程模拟中的应用 ...	215
5.1 结构化学计算	215
5.1.1 AccuModel 软件	216
5.1.2 Alchemy 2000™ 软件简介	231
5.2 化学反应过程模拟	234
5.2.1 Chemical Kinetics Simulator 1.0 的功能	235
5.2.2 Chemical Kinetics Simulator 1.0 的使用	238
5.2.3 Chemical Kinetics Simulator 1.0 的应用	248
思考题	251
练习题	252
第六章 计算机在化学教学中的应用	253
6.1 计算机辅助化学教学概述	253

6.2	计算机化学教学软件的资源	258
6.2.1	化学教师或者化学教师与计算机工程师合作编写	258
6.2.2	通过国际互联网获取教学课件	260
6.2.3	商业化计算机化学辅助教学软件	262
6.3	计算机无机及元素化学辅助教学	263
6.3.1	Chemical Elements.com Periodic Table of the Elements	264
6.3.2	Gmelin's Textbook Periodic Table	265
6.3.3	The MPEG Periodic Table	267
6.3.4	Periodic Table Live!	267
6.3.5	Interactive Periodic Table	269
6.4	仪器分析计算机辅助教学	270
6.4.1	计算机辅助核磁共振教学软件	271
6.4.2	计算机辅助色谱教学软件	275
6.4.3	质谱辅助教学课件	277
6.4.4	原子光谱辅助教学课件	278
6.4.5	其他仪器分析辅助教学软件	281
6.5	化学试题库软件	283
6.5.1	《高等化学试题库》开发的背景和指标	284
6.5.2	高等化学试题库的模块化和层次结构	287
6.5.3	高等化学试题库的功能	288
6.5.4	《高等化学试题库》的安装与使用	289
	思考题	293
	练习题	294
	附录 无机元素化学教学软件资源	294
第七章	计算机在数理统计与实验设计中的应用	299
7.1	概述	299
7.2	软件 STATISTICA 的使用界面、功能和基本指令	301
7.2.1	STATISTICA 软件功能和操作环境	301
7.2.2	STATISTICA 软件的操作界面	303
7.2.3	STATISTICA 软件的基本操作指令	305

7.2.4	处理数据的输入	306
7.2.5	基本统计操作	308
7.2.6	结果的显示和输出	311
7.3	计算机在化学实验设计中的应用	312
7.3.1	双水平因子设计	312
7.3.2	响应曲面设计	321
7.3.3	拉丁方实验设计法	328
7.4	实验数据的可靠性分析	332
7.4.1	实验误差分析	332
7.4.2	一致性检验—— t 检验	333
7.5	变量间相关性分析	337
7.5.1	一元线性回归	338
7.5.2	多元线性回归	341
7.5.3	非线性回归	343
7.6	实验结果的表述	344
	思考题	347
	练习题	347
第八章	计算机在化学实验室自动化方面的应用简介	349
8.1	概述	349
8.2	化学实验室仪器设备与材料的自动化管理系统	351
8.2.1	实验室信息自动化管理系统	351
8.2.2	化学药品与材料管理系统	354
8.2.3	仪器设备维护校正管理系统	356
8.3	实验数据的计算机化收集处理	357
8.3.1	实验数据的收集和分析	358
8.3.2	分析数据的计算机化处理	360
8.4	化学数据库技术在分析化学实验室中的应用	364
8.4.1	化合物信息数据库	364
8.4.2	光谱信息数据库	365
	思考题	369

第九章 计算机专家系统在化学中的应用简介	371
9.1 概述	371
9.2 聚合物阻燃配方专家系统 FRES1.0 简介	375
9.3 FRES1.0 的使用	378
9.3.1 通过配方咨询系统直接获取聚合物阻燃配方	379
9.3.2 通过实验获取配方数据	381
9.4 计算机辅助复杂分子结构分析专家系统	387
9.4.1 化合物分类法解释程序	388
9.4.2 启发式解释程序(DENDRAL 程序)	389
参考文献	391
思考题	391