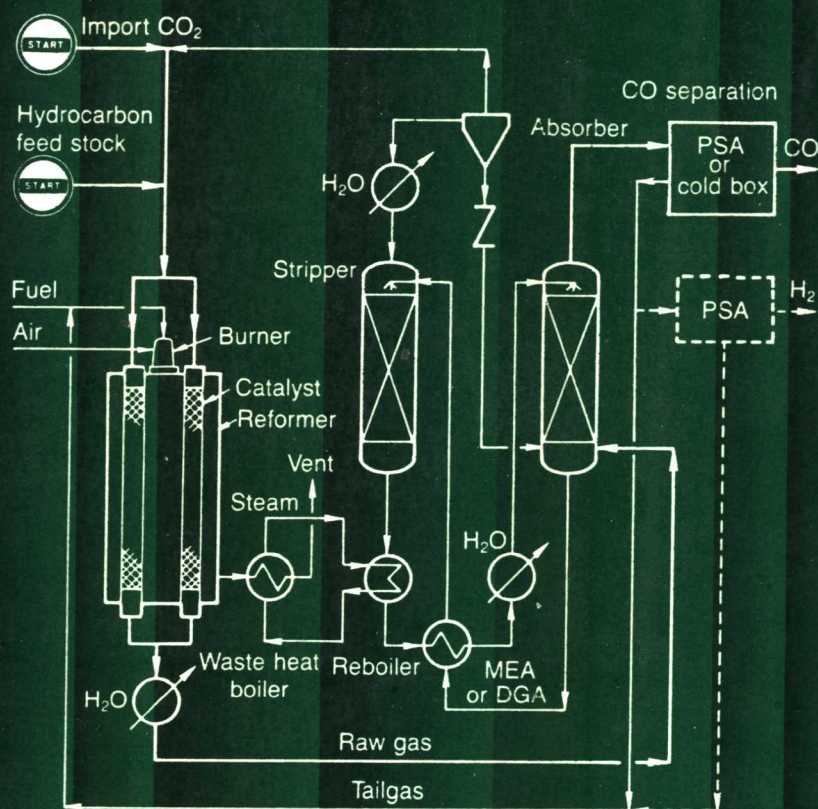


電腦在化學上的 應用與範例

游瑞成 編著



松崗電腦圖書資料有限公司

電腦在化學上的 應用與範例

游瑞成 編著

松崗電腦圖書資料有限公司 印行

松崗電腦圖書資料有限公司已
聘任本律師為常年法律顧問，
如有侵害其著作權或其他權益
者，本律師當依法保障之。

長立國際法律事務所

陳 長 律師



電腦在化學上的應用與範例

編著者：游 瑞 成

發行人：朱 小 珍

發行所：松崗電腦圖書資料有限公司

台北市仁愛路二段一一〇號三樓

電 話：3930255

郵政劃撥：0109030-8

印刷者：建發印刷設計公司

中華民國七十五年八月初版

版權所有



翻印必究

每本定價 210 元整

書號：3101174

本出版社經行政院新聞局核准登記，登記號碼為局版台業字第三一九六號

譯著序

程式設計及數值分析這兩門課，在理工學院及工業專校裏均屬必修的課程。這兩門課分別提供學生有關程式語言的基本指令及求解各類型問題所需的理論與邏輯。一個學生對於電腦的應用，除了必需具備前述知識外，更重要的是懂得去應用它。本書的主要目的便是透過不同深淺的問題引導讀者使用電腦解決有關的化學問題。

本書的內容含蓋了物理化學，有機化學，分析化學，光譜分析等學科。所選用的範例，在各學科中均屬極典型，極具普遍性的問題，故在每一個程式前亦僅做簡單的理論介紹，若讀者有不明處，或擬更深一層了解，可就一般教科書中查閱之。

書中所列各程式適合於一般的個人電腦，容或電腦廠牌不同，所需的修改亦極微。書中程式所用語言為BASIC，該語言正如其文，乃是一種簡單，易懂，功能強的電腦語言。讀者閱讀本書不必具有很深的電腦知識，只須循序漸進，便可步入程式設計的堂奧。

譯者翻譯此書時，正墊居於印尼沼澤荒野地，雖安靜而專心，但參考資料全無，故內容上恐難免不當，是以願我學界方家不吝指正為禱！

游 瑞 成

1976. 3. 29

目 錄

程式 1-A	碳氫化合物的分子量	1
程式 1-B	任意雙原子分子的分子量計量法	4
程式 1-C	任意數目的雙原子分子的分子量求法	7
程式 1-D	多原子分子的分子量求法	10
程式 2	華氏溫度與攝氏溫度的換算	14
程式 3-A	理想氣體定律	18
程式 3-B	理想氣體定律解法的一般化	22
程式 4-A	理想氣體及凡得瓦爾氣體的計算	26
程式 4-B	理想及凡得瓦爾氣體的混合計算	30
程式 5	溶液的不同濃度表法間的轉換	33
程式 6	氣體分子的運動速率	37
程式 7	分子量的凝固點下降求法	42
程式 8	陣列的運算	45
程式 9-A	元素分析與實驗式	53
程式 9-B	由元素分析求取合理的實驗式	57
程式 10	氫原子光譜	61
程式 11	無機元素的定性分析	68
程式 12	重複估計代入法求弱酸的酸鹼度	73
程式 13	以估計法解弱酸溶液的酸鹼度	78

程式 14	繪圖.....	83
程式 15	弱酸強碱的酸碱滴定模擬.....	93
程式 16	弱碱與強酸的酸碱滴定模擬	101
程式 17	電位滴定的模擬	110
程式 18	滴定終點的確定法.....	119
程式 19	有機化學合成	124
程式 20	分子質量及百分組成的計算	131
程式 21-A	由質譜的母離子峰求取分子式(一)	137
程式 21-B	由質譜的母離子峰求取分子式(二)	141
程式 22	分餾	145
程式 23	分餾的相圖.....	149
程式 24	核磁共振吸收峰的分析	155
程式 25	X—射線繞射分析	158
程式 26	阿爾發粒子散射分析	163
程式 27	原子核之給合能與半徑	166
程式 28	荷電粒子在磁場內的圓運動	170
程式 29	蒙特卡羅的圓週率求法	173
程式 30	二分法求根	177
程式 31	辛普森積分法	180
程式 32	由熱容量計算熵	184
程式 33	微分方程式解法	188
程式 34	統計數據的評估	193
程式 35	直線的最小平方法定線法	200
程式 36	比爾律	206
程式 37	紅外光譜	211
程式 38	熱力學諸參數的解法	218

程式 39	指數的定曲線法	222
程式 40	化學動力學	227
程式 41	二次曲線最小平方定線法	233
程式 42-A	反矩陣的求法.....	241
程式 42-B	矩陣指令與矩陣運算	251
程式 43	質譜的混合物定量分析	257
程式 44	通用最小平方法	264

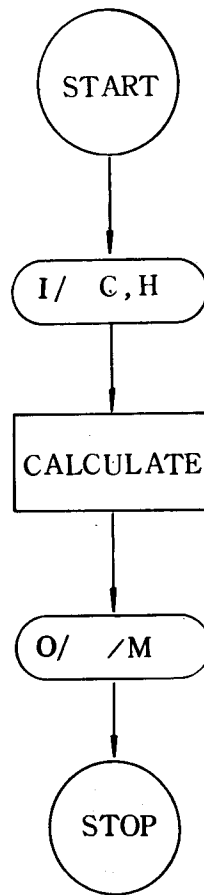
程式 1-A 碳氫化合物的分子量

本程式將用來計算任何僅含碳及氫兩種元素的化合物之分子量。在程式中，首先便是一個 REMARK 的敘述，其作用僅在提示程式的用途，並不被電腦執行。第一個可執行敘述（executable statment）是 INPUT 指令，其作用是令電腦接受由使用者輸入的兩個數字。第一個輸入的數字以變數 C 接受，第二個數字則存於變數 H。該兩數字分別代表碳及氫的原子個數。

第二個可執行的步驟是計算分子量（單位克），以 M 表之。其計算方式是以碳的原子個數 C，乘以原子量 12.011，加上氫原子數與氫原子量 1.008 之積。此敘述之首的 LET 是可有，亦可除去不用，通常因其不影響結果，固均不書寫。

接着在 70 的敘述裏，便是命令電腦將最後的 M 直輸出，在 BASIC 語言系統，視廠牌，機種及機型的不同，對於所輸出的數字，在不同位數加以切除。且通常數字後的零若未加特別指令的指示通常均省略，就算是有效位數亦同。

最後一個可執行的敘述是 STOP 指令，是令電腦停止程式的執行



流程圖 1-A

```

10 REM  MOLAR MASS (IN GRAMS) OF A HYDROCARBON
50 INPUT C, H
60 LET M = 12.011*C + 1.008*H
70 PRINT M
90 STOP
95 END

```

```

READY
RUN

```

```

?2,6
30.07

```

```

READY
RUN

```

```

?7,8
92.141

```

```

READY

```

程式 1 - A

，將控制轉回 BASIC 的監督程式。此時，螢光幕或輸出器上將顯示 READY 字樣。

置於程式最後的是 END，為一非執行性的敘述，乃是通知編輯程式，該程式結束。

在輸出部份，分子量 30.07 得自化合物 C_2H_6 。當計算第二個化合物 C_7H_8 時，需先輸入一個 RUN 的指令，以便再次起動該程式，然後才分別把碳及氫的原子數目輸入，以利再次的運算。

程式 1-B 任意雙原子分子的 分子量計算法

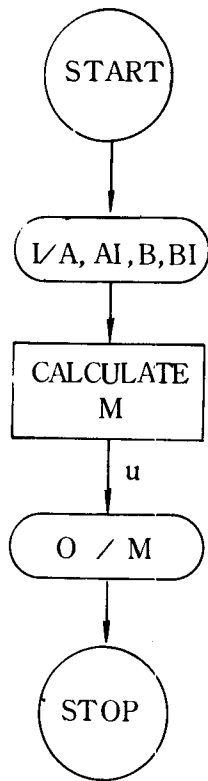
程式 1-B 比 1-A 具有更廣泛的通用性，可以用來計算任何雙原子分子的分子量。而 1-A 中，僅能用來求取碳氫化合物而已。

本程式中，採取的是分子中的原子量及原子個數均分別以 INP-UT 的方式，由程式使用者輸入。因此，本程式的另一功能是可以任意的單位表示化合物的分子量。若程式使用者以克為單位輸入，則輸出亦為克。若以原子質量單位 (atomic mass unit) 輸入，則輸出亦為原子質量單位。

在這一程式裏，第一個可執行程式敘述是命令電腦接受並儲存四個數字，以 A 及 B 接受分子內的原子個數，以 A1 及 B1 接受 原子質量。

次一可執行敘述則是以普通乘法，計算分子量 M。此外，其他各步驟與程式 1-A 完全相同。

本程式計算的化合物分別為 C_7H_8 及 H_2O 。



流程圖 1-B

```
10 REM  Molar mass of any binary compound
50 INPUT A,A1, B,B1
60 LET M = A*A1 + B*B1
70 PRINT M
90 STOP
95 END
```

READY
RUN

77.12.011, 8.1.008
92.141

READY
RUN

72.1.008, 1.15.999
18.015

程式 1-B

程式 1-C 任意數目的雙原子 分子的分子量求法

本程式將把程式 1-B 做更大程度的修改，使其更具廣泛的使用性。不論 1-A 或 1-B，程式每執行一次僅能計算一種化合物的分子量。但本程式則可以執行任意數目的分子量計算。

將程式 1-C 與 1-B 比較，總共多了序碼 20，30 及 80 等三個步驟。

序碼 20 的 N ，乃是將處理的化合物個數，以 INPUT 方式輸入。本例中， $N = 3$ ，乃是有三個待求的分子量之意。 N 同時也是 FOR-NEXT 環的執行次數。在序碼 30 及 80 間的 50，60 及 70 三步驟總計將依序被執行三次。

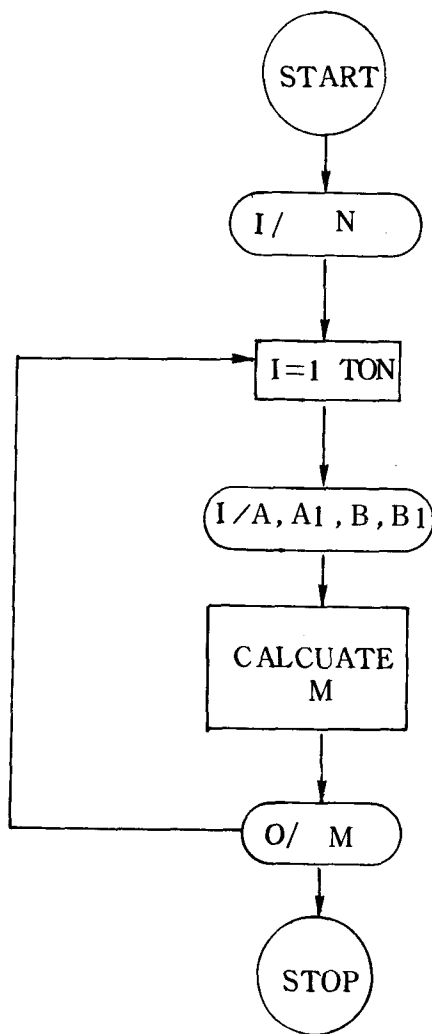
序碼 30 中的變數 I ，是用來累進及控制環的執行次數。本例中，累進值為 1，因此 STEP 1 被省略。所以 30 的敘述所表示的意義與下述同：

```
30  FOR  I=1  TO  N  STEP  1
```

當程式每回執行至序碼 80 時，電腦便必須比較 I 及 N 值，是否 I 值已經累積到等於或大於 N 。若 I 值仍小於 N ，則 I 值再累加 1，

然後程式的執行重新返回步驟 50，再一次環的執行。直到 I 值等於或大於 N 直，才結束該環的執行，轉往環下方的第一個步驟。在本程式中，環下方的第一個步驟為序碼 90 的 STOP 敘述，該步驟的執行結束了程式的進一步處理。

在本程式中，我們分別計算了 H_2O ， N_2O_5 及 BF_3 三種的化合物。



流程圖 1 - C 任意個數的分子量計算法

```
10 REM  MOLAR MASSES OF SEVERAL BINARY COMPOUNDS
20 INPUT N
30 FOR I=1 TO N
40 INPUT A,A1, B,B1
50 LET M = A*A1 + B*B1
60 PRINT M
70 NEXT I
80 STOP
95 END
```

READY
RUN

```
73
72,1.008, 1,15.999
18.015
72,14.007, 5,15.999
108.009
71,10.81, 3,18.998
67.804
```

TIME: 0.10 SECS.

READY

程式 1-C

程式 1-D 多原子分子的 分子量求法

本程式我們將進一步的把程式 1-C 再擴充，使得程式 可以一次處理數個多原子分子 (multiple - element compound)。程式 1-C，雖然執行一次可同時處理數個分子，但却僅限於雙原子分子 (binary element compound)。程式 1-D 則為任意數目的多原子分子。

與程式 1-C 相較，由序碼 35 至 65 間的各步驟均為 1-D 特有的。每一待處理的化合物所含的原子種類個數 K，乃是當程式執行時由使用者輸入，而不是事先於程式中設下定直。

在序碼 45 至 65 間，另有一 FOR - NEXT 的內環，其功用是處理同一化合物的所有元素，其累積變數 J，是由 1 至 K。在這一內環裏，環每執行一次便輸入一種元素的原子個數，由 A 接受；及該元素的原子量，由 A1 接受。然後將兩者的乘積， $A * A1$ ，累加至代表分子量的變數 M 裏。當內環執行完成後，同時也輸出分子量，並且依序碼 75 的指示，輸出一空行。該空行的作用在避免輸出的資料太擁擠。