

目 次

1	コンピュータエイジと化学研究	1
2	化学におけるマイクロコンピュータ	7
2・1	はじめに	7
2・2	マイコンとは	9
2・3	マイコンのソフトウェア	15
2・4	化学におけるマイコンの利用の例	35
3	化学で扱う数値や関数	51
3・1	電卓に親しもう——逆説的マイコン術——	51
3・2	数値計算の常識	56
3・3	マイコンの関数計算	66
3・4	マイコンによる曲線の表示	76

4	化学実験のシミュレーション	83
	液体中での物体の落下運動	83
	波の干渉	86
	磁場中での荷電粒子の運動	89
	ラザフォード散乱	93
	水素原子および水素分子イオンの電子雲モデル	98
	水の分子振動	102
	中和滴定 I	105
	中和滴定 II	108
	ポーラログラム	111
	錯体の濃度分布図	114
	化学反応のシミュレーション	116
5	コンピュータによる化学情報学の学習	121
	5・1 はじめに	121
	5・2 分子構造のディスプレイ	121
	5・3 化学構造の数式的表現	129
	5・4 パターン認識の化学への応用	139
	5・5 化学データとファイル検索	150
	5・6 おわりに	153
6	マイコンによる IR スペクトル解析	155
	6・1 はじめに	155
	6・2 IR スペクトルの一般的な解析手順とコンピュータの導入	156
	6・3 部分構造解析システムの概要	157

6・4 評価点計算法による部分構造解析システム 172

6・5 お わ り に 174