

کاربرد کامپیوتر در شیمی

تدوین کنندگان:

دکتر عبد الحسین ناصری (دانشگاه تبریز)

دکتر سید رضا نبیری (دانشگاه مازندران)

دکتر مهتاب پیروزمند (دانشگاه تبریز)

ساحله شیخی زاده میزان (دانشگاه تبریز)

انتشارات دانشگاه تبریز

بهار ۱۳۹۵

عنوان و پدیدآور	کاربرد کامپیوتر در شیمی / تدوین عبدالحسین ناصری ... [و دیگران]
مشخصات نشر	تبریز؛ دانشگاه تبریز، ۱۳۹۵.
مشخصات ظاهری	۴۴۰ص؛ مصور (رنگی)، جدول (رنگی)، نمودار (رنگی).
فروست	انتشارات دانشگاه تبریز؛ ۶۸۰.
شابک	۲-۶۷-۷۲۰۴-۶۰۰-۹۷۸-۲۲۰۰۰۰ ریال
وضعیت فهرست نویسی	فیبا
یادداشت	تدوین عبدالحسین ناصری، سید رضا نبوی، مهتاب پیروزمند، ساحله شیخی زاده میزان
یادداشت	کتابنامه
موضوع	شیمی - - داده پردازي
موضوع	Chemistry - Data processing
شناسه افزوده	ناصری، عبدالحسین
شناسه ورود	دانشگاه تبریز
رده بندی سنگره	QD۳۹/۳/۵۲۵۲ ۱۳۹۵:
رده بندی دیویی	۵۴۲/۸۵۵۱
شماره کتابشناسی	۴۲۳۴



انتشارات دانشگاه تبریز

کاربرد کامپیوتر در شیمی

تدوین:	دکتر عبدالحسین ناصری / دکتر سید رضا نبوی - دکتر مهتاب پیروزمند - ساحله شیخی زاده میزان
ویراستاری علمی و ادبی:	دکتر عبدالحسین ناصری
ناشر و فروست:	انتشارات دانشگاه تبریز؛ ۶۸۰
تاریخ و نوبت چاپ:	۱۳۹۵ - اول
شمارگان:	۱۵۰۰ نسخه
شابک:	۲-۶۷-۷۲۰۴-۶۰۰-۹۷۸
قیمت:	۲۲۰۰۰۰/- ریال
لیتوگرافی، چاپ و صحافی:	اداره چاپ و انتشارات دانشگاه تبریز

این اثر مشمول قانون حمایت از مولفان و مصنفان و هنرمندان مصوب ۱۳۴۸ است. هر کس تمام یا قسمتی از این اثر را بدون اجازه ناشر، نشر یا پخش کند مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

نشانی: تبریز - بلوار ۲۹ بهمن - دانشگاه تبریز - تلفن: ۳۳۳۹۲۶۶۹ / نامبر: ۳۳۳۴۲۵۶۲

پیش‌گفتار

سپاس و ستایش خداوند بزرگ را که فرصت تهیه و تالیف این کتاب را به ما عطا کرد. کتاب حاضر که با عنوان کاربرد کامپیوتر در شیمی ارائه می‌شود نتیجه تجربه مولفین در تدریس این درس در قالب عناوین مختلف برای گرایش‌های مختلف شیمی در مقاطع کارشناسی و کارشناسی ارشد می‌باشد. هر چند ممکن است که برخی مطالب این کتاب به صورت پراکنده در منابع مختلف آمده باشد ولی نبود منبع فارسی جامع که بتواند این مطالب را پوشش دهد ما را بر آن داشت که این کتاب را تالیف نموده و پاسخی به نیاز دانشجویان و جامعه علمی کشور داده باشیم.

کتاب حاضر در چهار بخش و چهارده فصل تنظیم شده است. بخش اول که فصل اول را در برمی‌گیرد به آشنایی مختصر با اجزاء کامپیوتری می‌پردازد. در بخش دوم که شامل پنج فصل هست به آشنایی و کاربردهای مختلف اکس در شیمی پرداخته شده است. بخش سوم اختصاص به متلب دارد که شامل پنج فصل هست. سیمی است در این فصل‌ها نیازهای دانشجویان پاسخ داده شود. در بخش آخر که شامل سه فصل هست دانش‌بنویان ابتدا با مجموعه Chem Office آشنا می‌شوند که شامل Chem Draw و Chem3D می‌باشد و در انتها به Hyperchem پرداخته شده است.

با توجه به اینکه چاپ ویرایش اول کتاب است طبیعی است که دارای اشکالات زیادی باشد به همین دلیل با آغوش باز مشتاق دریافت انتقادات و راهنمایی‌های سرزده اساتید محترم و دانشجویان عزیز هستیم تا در چاپهای بعدی کتاب بتوانیم این اشکالات را به حداقل برسانیم. فلذا از اساتید و دانشجویان عزیز خواهشمند است نظرات اصلاحی خود را به آدرس پست الکترونیکی ab.naseri@gmail.com ارسال فرمایند.

با توجه به گسترده بودن کاربرد های کامپیوتر در شیمی، امکان پوشش همه آنها در قالب یک کتاب فراهم نیست بنابراین مولفین سعی نموده اند برخی مباحث را که مطالب پایه بوده

و دارای کاربرد بیشتری می باشند پوشش دهند. مخاطبین هدف در نگارش این کتاب، دانشجویان مقطع کارشناسی و کارشناسی ارشد رشته شیمی می باشند. در عین حال مطالب برخی فصل ها برای رشته های دیگر هم می تواند مفید باشد.

وظیفه خود می دانیم که از همه کسانی که در تالیف و آماده سازی این کتاب ما را حمایت و تشویق نموده اند علی الخصوص از معاونت محترم پژوهشی دانشگاه، شورای انتشارات دانشگاه تبریز و کلیه کارکنان انتشارات دانشگاه تبریز تشکر و قدردانی کنیم. از دوران محترم که زحمت داوری را تقبل نموده و در اسرع وقت این کار را انجام دادند سپاسگزاری می شود. همچنین از کلیه کارکنان انتشارات دانشگاه تبریز به دلیل ایجاد امکانات جهت چاپ کتاب فوق قدردانی می شود.

مؤلفان

فصل اول: آشنایی با مبانی کامپیوتر

۱	۱-۱ اجزای کامپیوتر
۱	۱-۱-۱ سخت افزار
۲	۱-۱-۲ نرم افزار
۳	۲-۱ سیستم عامل منبع باز
۵	۳-۱ زبان برنامه نویسی
۶	۱-۳-۱ سطح در زبانهای برنامه نویسی
۶	۴-۱ کامپایلر و مفسر
۷	۱-۴-۱ تفسیر کامپایلر و مفسر
۸	۵-۱ منابع

فصل دوم: آشنایی با اکسل

۹	۱-۲ مقدمه
۱۰	۲-۲ معرفی صفحه گسترده
۱۱	۳-۲ وارد کردن داده ها در صفحه گسترده
۱۲	۱-۳-۲ وارد کردن داده ها
۱۴	۴-۲ رسم نمودارها، رویه ها و سایر اشکال در اکسل
۱۵	۱-۴-۲ رسم یک نمودار
۲۳	۲-۴-۲ رسم چند نمودار در یک شکل
۲۵	۳-۴-۲ سازمان دهی نمودار
۳۰	۴-۴-۲ رسم نمودارهای پیشرفته
۳۳	۵-۲ عملیات ریاضی و آشنایی با عملگرها
۳۷	۶-۲ آشنایی با برخی توابع و نحوه استفاده از آنها
۳۸	۷-۲ آدرس دهی مطلق و نسبی
۴۳	۸-۲ فیلتر کردن داده ها و مرتب نمودن آنها
۴۶	۹-۲ چند مثال کاربردی از شیمی
۵۰	۱۰-۲ تمرینات
۵۳	۱۱-۲ منابع

فصل سوم: برآزش در محیط اکسل و مثالهایی از کاربرد آن در شیمی

۵۵	۱-۳ مقدمه ای بر برآزش.....
۵۶	۲-۳ بیان اصول رگرسیون خطی و انجام آن در اکسل.....
۵۷	۱-۲-۳ آشنایی با TREND.....
۶۱	۲-۲-۳ انجام رگرسیون خطی با استفاده از LINEST.....
۶۷	۳-۳ آشنایی با چند جمله ایها و رگرسیون چند جمله ایها.....
۷۰	۴-۳ ابزار Regression excel.....
۷۲	۱-۴-۳ رگرسیون خطی چند متغیره.....
۷۵	۲-۴-۳ بررسی معنی دار بودن عرض از مبدا و ضرایب رگرسیون در رگرسیونهای خطی.....
۷۷	۵-۳ آشنایی با رگرسیون غیر خطی و انجام آن در اکسل با استفاده از ماکرو Solver.....
۸۳	۶-۳ تمرینات.....
۸۶	۷-۳ منابع.....
	فصل چهارم: آنالیزهای آمار، در محیط اکسل و مثالهایی از کاربرد آنها در شیمی
۸۷	۱-۴ مقدمه ای بر آزمونهای آماری.....
۸۹	۲-۴ آزمون F و نحوه انجام آن در اکسل.....
۹۲	۳-۴ آزمون T.....
۹۲	۱-۳-۴ مقایسه یک میانگین تجربی با یک مقدار معلوم.....
۹۳	۲-۳-۴ مقایسه میانگین های دو نمونه با استفاده از آزمون T.....
۹۸	۳-۳-۴ آزمون t دوبدو.....
۱۰۰	۴-۴ تحلیل واریانس.....
۱۰۰	۱-۴-۴ تحلیل واریانس یک طرفه.....
۱۰۴	۲-۴-۴ تحلیل واریانس دو طرفه.....
۱۱۲	۵-۴ میله های خطا.....
۱۱۵	۶-۴ محاسبه واریانس - کوواریانس.....
۱۱۸	۷-۴ محاسبه همبستگی.....
۱۱۹	۸-۴ ایجاد داده های تصادفی.....
۱۲۰	۱-۸-۴ تابع Rand.....
۱۲۰	۲-۸-۴ تابع Randbetween.....
۱۲۰	۳-۸-۴ استفاده از جعبه ابزار Analysis Toolpak.....
۱۲۱	۴-۸-۴ تصادفی کردن یک سری اعداد یا متن.....
۱۲۲	۹-۴ نحوه محاسبه حد تشخیص در آنالیزهای کمی.....
۱۲۴	۱۰-۴ تمرینات.....

۱۲۶ ۱۱-۴ منابع

فصل پنجم: انجام محاسبات عددی در محیط اکسل و مثالهایی از کاربرد آنها در شیمی

۱۲۷ ۱-۵ مقدمه

۱۲۷ ۲-۵ مشتق گیری عددی و استفاده از آن در نمودارهای تیتراسیونها

۱۲۸ ۱-۲-۵ محاسبه مشتق عددی زمانی که ضابطه یا فرمول تابع معین باشد

۱۳۰ ۲-۲-۵ محاسبه مشتق عددی زمانی که فقط جدولی از مقادیر تابع معلوم هست

۱۳۲ ۳-۵ حل عددی معادلات دیفرانسیل

۱۳۳ ۱-۳-۵ روش اویلر برای حل عددی معادلات دیفرانسیل

۱۳۶ ۲-۳-۵ حل عددی معادلات دیفرانسیل با روش رانگ-کوتا

۱۳۸ ۴-۵ انتگرال گیری عددی

۱۳۹ ۱-۴-۵ روش مستطیبی

۱۴۱ ۲-۴-۵ روش دوزنقه

۱۴۲ ۵-۵ حل معادلات غیر خطی

۱۴۳ ۱-۵-۵ روش نیوتن-رافسون

۱۵۱ ۶-۵ حل دستگاه معادلات خطی

۱۵۳ ۱-۶-۵ حل دستگاه سه معادله سه مجهول

۲-۶-۵ حل معادلات خطی در حالتی که تعداد معادلات بیشتر از تعداد مجهولات

۱۵۴ باشد

۱۵۶ ۷-۵ تمرینات

فصل ششم: آشنایی با ماکرو

۱۵۹ ۱-۶ ماکرو در اکسل

۱۶۰ ۱-۱-۶ ساختار یک ماکرو sub

۱۶۸ ۲-۱-۶ تعریف یک تابع جدید با استفاده از ماکرو function

۱۷۲ ۲-۶ اضافه کردن اسکروول بار به یک سل و نحوه استفاده از آن

۱۷۶ ۳-۶ تمرینات

۱۸۰ ۴-۶ منابع

فصل هفتم: آشنایی با محیط نرم افزار متلب

۱۸۱	 معرفی نرم افزار	۱-۷
۱۸۲	 پنجره های متلب	۲-۷
۱۸۳	 پنجره فرمان	۱-۲-۷
۱۸۴	 پنجره فضای متغیرها و مسیر جاری	۲-۲-۷
۱۸۵	 پنجره تاریخچه دستورات	۳-۲-۷
۱۸۵	 تنظیمات اولیه	۳-۷
۱۸۶	 متغیرها و عملگرها	۴-۷
۱۸۷	 متغیرهای عددی و غیر عددی	۱-۴-۷
۱۸۸	 عملگرها	۲-۴-۷
۱۹۰	 تقدم عملگرهای محاسباتی	۳-۴-۷
۱۹۰	 بتهای از پیش تعیین شده	۴-۴-۷
۱۹۱	 دستور و تابع	۵-۷
۱۹۶	 استفاده از سبدها	۶-۷
۱۹۷	 نرم افزار ای-ماتلب معادل متلب	۷-۷
۱۹۷	 تمرینات	۸-۷
۱۹۹	 منابع	۹-۷
فصل هشتم: آرایه ها		
۲۰۱	 ایجاد بردار و ماتریس در متلب	۱-۸
۲۰۳	 بیان یک مساله به زبان بردار یا ماتریس	۲-۸
۲۰۴	 آدرس دهی در آرایه ها	۳-۸
۲۰۵	 دستکاری آرایه ها	۴-۸
۲۰۷	 محاسبات روی بردارها و ماتریسها	۵-۸
۲۰۷	 عملیات جمع و تفریق	۱-۵-۸
۲۰۸	 عملیات ضرب	۲-۵-۸
۲۰۹	 عملیات تقسیم	۳-۵-۸
۲۱۴	 عملیات درایه به درایه	۴-۵-۸
۲۱۵	 توابع متلب در بردارها و ماتریسها	۶-۸
۲۱۹	 آرایه های چند بعدی	۷-۸
۲۲۱	 توابع متلب در آرایه های چند بعدی	۱-۷-۸
۲۲۲	 آرایه های سلولی و ساختمانها	۸-۸
۲۲۴	 ایجاد آرایه های سلولی	۱-۸-۸
۲۲۷	 ایجاد ساختمان	۲-۸-۸
۲۳۲	 تمرینات	۹-۸
۲۳۵	 منابع	۱۰-۸

فصل نهم: توابع در متلب و برنامه نویسی

۲۳۷	۱-۹ برنامه کامپیوتری چیست؟.....
۲۳۷	۲-۹ الگوریتم و فلوچارت.....
۲۳۸	۳-۹ ایجاد یک برنامه یا کد در متلب.....
۲۳۹	۱-۳-۹ ایجاد یک اسکریپت.....
۲۴۲	۴-۹ آشنایی با دستورات برنامه نویسی.....
۲۴۲	۱-۴-۹ دستورات ورودی-خروجی.....
۲۴۶	۲-۴-۹ ذخیره سازی و خواندن داده.....
۲۵۲	۳-۴-۹ عملگرهای مقایسه ای و منطقی.....
۲۵۴	۴-۴-۹ توابع منطقی.....
۲۵۵	۵-۴-۹ شرطها و لوک های شرطی و سویچ ها.....
۲۶۱	۶-۴-۹ حلقه های تکرار.....
۲۶۹	۵-۹ ایجاد توابع توسط فایل.....
۲۷۰	۱-۵-۹ ایجاد تابع در متلب.....
۲۷۲	۶-۹ توابع بدون مشخصه.....
۲۷۳	۷-۹ گرافیک در متلب.....
۲۷۳	۱-۷-۹ رسم نمودارهای دو بعدی.....
۲۷۹	۲-۷-۹ ایجاد چند پنجره شکل.....
۲۸۰	۳-۷-۹ رسم نمودارهای سه بعدی.....
۲۸۵	۴-۷-۹ رسم نمایه خطا.....
۲۸۶	۵-۷-۹ رسم نمودارهای خاص.....
۲۸۷	۸-۹ تمرینات.....
۲۹۲	۹-۹ منابع.....

فصل دهم: محاسبات عددی در متلب

۲۹۳	۱-۱۰ چند جمله ای ها.....
۲۹۴	۱-۱-۱۰ محاسبه مقدار عددی چند جمله ای و رسم آن.....
۲۹۵	۲-۱-۱۰ محاسبه ریشه های چند جمله ای.....
۲۹۶	۲-۱۰ برازش خط و منحنی.....

۳۹۸	 ۳-۱۰ درون یابی
۳۰۰	 ۱-۳-۱۰ درون یابی دو بعدی
۳۰۳	 ۴-۱۰ مشتق گیری و انتگرال گیری عددی
۳۰۵	 ۵-۱۰ حل معادلات غیر خطی
۳۰۸	 ۶-۱۰ بهینه سازی و تخمین پارامترها
۳۱۲	 ۷-۱۰ حل عددی معادلات دیفرانسیل معمولی
۳۱۵	 ۸-۱۰ برنامه هایی برای حل مسائل شیمی
۳۱۵	 ۱-۸-۱۰ شبیه سازی تیتراسیون اسید ضعیف با باز قوی
۳۱۹	 ۲-۸-۱۰ محاسبه و رسم ضریب تراکم پذیری کربن دی اکسید
۳۲۱	 ۳-۸-۱۰ مشتق گیری عددی از داده های تیتراسیون pH متری
۳۲۵	 ۸-۱۰ منحنی تقطیر
۳۳۰	 ۱-۸-۱۰ نقطه ساده دیفرانسیلی
۳۳۳	 ۹-۱۰ تمرینات
۳۳۷	 ۱۰-۱۰ منابع

فصل یازدهم: محاسبات، تالیلی

۳۳۹	 ۱-۱۱ تعریف متغیرها و عبارتهای سمبولیک
۳۴۱	 ۲-۱۱ توابع سیمبولیک
۳۴۲	 ۳-۱۱ توابع عمومی
۳۴۴	 ۴-۱۱ حل معادلات جبری
۳۴۴	 ۵-۱۱ رسم توابع تحلیلی
۳۴۵	 ۶-۱۱ مشتق گیری و انتگرال گیری
۳۴۶	 ۷-۱۱ حل معادلات جبری
۳۴۸	 ۸-۱۱ حل تحلیلی معادلات دیفرانسیل معمولی
۳۵۰	 ۹-۱۱ حل مسائل شیمی با محاسبات سیمبولیک
۳۵۲	 ۱۰-۱۱ تمرینات
۳۵۴	 ۱۲-۱۱ منابع

فصل دوازدهم: آشنایی با نرم افزار Chemdraw

۳۵۵	 ۱-۱۲ مقدمه ای بر Chem Office
۳۵۵	 ۲-۱۲ صفحه اصلی ChemDraw
۳۵۶	 ۳-۱۲ آشنایی با ابزارهای اصلی (Main Tools)
۳۵۸	 ۱-۳-۱۲ کلید های Lasso و Marquee
۳۵۸	 ۲-۳-۱۲ ابزار های رسم پیوند Drawing Bonds
۳۵۸	 ۳-۳-۱۲ کلید Mass Fragmentation
۳۵۹	 ۴-۳-۱۲ کلید Eraser

۳۵۹	 Pen	کلید ۵-۳-۱۲
۳۵۹	 Text	کلید ۶-۳-۱۲
۳۵۹	 Arrows	کلید ۷-۳-۱۲
۳۵۹	 Orbitals	کلید ۸-۳-۱۲
۳۶۰	 Drawing Elements	کلید ۹-۳-۱۲
۳۶۰	 Brackets	کلید ۱۰-۳-۱۲
۳۶۰	 Chemical Symbols	کلید ۱۱-۳-۱۲
۳۶۱	 TLC Plate	کلید ۱۲-۳-۱۲
۳۶۱	 Cyclo Ring	ساختارهای حلقوی ۱۳-۳-۱۲
۳۶۱	 Templates	کلید ۱۴-۳-۱۲
۳۶۲	 Structure Perspective	کلید ۱۵-۳-۱۲
۳۶۲	 Acyclic Chain	کلید ۱۶-۳-۱۲
۳۶۲	 ۴-معرفی منوهای کاربردی	۴-۱۲
۳۶۲	 view	معرفی منو ۱-۴-۱۲
۳۶۶	 Object	معرفی منو ۲-۴-۱۲
۳۶۷	 Structure	معرفی منو ۳-۴-۱۲
۳۷۱	 ۵-مثال های کاربردی	۵-۱۲
۳۸۰	 ۶-تمرینات	۶-۱۲

فصل سیزدهم: آشنایی با برنامه Chem3D

۳۸۳	 ۱-آشنایی با نوار ابزار	۱-۱۳
۳۸۴	 Chem3D	رسم ساختار در محیط ۲-۱۳
۳۸۴	 ۱-۲-وارد کردن فرمول شیمیایی	۱-۱۳
۳۸۵	 ۲-۲-رسم ساختار در صفحه کاری	۲-۱۳
۳۸۵	 ChemDraw	وارد کردن فرمول رسم شده در ۳-۲-۱۳
۳۸۵	 ۳-نحوه نمایش ساختارهای سه بعدی رسم شده	۳-۱۳
۳۸۷	 ۴-معرفی منوهای کاربردی	۴-۱۳
۳۸۷	 view	معرفی منو ۱-۴-۱۳
۳۹۴	 Object	معرفی منو ۲-۴-۱۳

۳۹۵	 MOPAC ۳-۴-۱۳ معرفی منو
۳۹۸	 Chem3D ۵-۱۳ برخی کاربردهای برنامه
۳۹۸	 ۱-۵-۱۳ بهینه سازی انرژی مولکول و تاثیر آن
۴۰۰	 ۲-۵-۱۳ مطالعه سد انرژی چرخشی حول یک پیوند
۴۰۲	 ۳-۵-۱۳ مشاهده اربیتال مولکولی
۴۰۴	 ۶-۱۳ تمرینات

فصل چهاردهم: آشنایی با نرم افزار HyperChem

۴۰۷	 ۱-۱۴ آشنایی با نرم افزار
۴۰۸	 ۱-۱۴ نرم افزار ساختار در محیط hyperchem
۴۱۲	 ۳-۱۴ رسم و مشاهده ساختارهای بلوری
۴۱۵	 ۴-۱۴ برخی کاربردهای برنامه hyperchem
۴۱۵	 ۱-۴-۱۴ بهینه سازی ژئومتری (Geometry Optimization)
۴۱۹	 ۲-۴-۱۴ مشاهده طیف ارتعاشی و طیف الکترونی ترکیبات
۴۲۳	 ۳-۴-۱۴ مطالعه اربیتال مولکولی
۴۲۸	 ۵-۱۴ تمرینات
۴۳۱	 پیوست ها