

مبانی تئوری

و

کاربردی شیمی محاسباتی

شامل:

آموزش محاسبات گوسین تحت لینوکس ۰۳

بیان تئوری شیمی محاسباتی به زبان ساده

آموزش نرم افزارهای رایجی و محاسباتی شیمی

AIM, ChemOffice, Gaussview, Gaussian

Hyperchem, Molnote, Spartan, NBO, VEDA

بررسی انواع خطای گوسین و رفع آنها

آموزش نصب نرم افزارهای شیمی محاسباتی تحت لینوکس و لینوکس

نوشته‌ی:

صادقعلی باوفا - نرگس استاد حسینی

سرشناسه : باوفا، صادقعلی، ۱۳۶۲ -
 عنوان و نام پدیدآور : مبانی تئوری و کاربردی شیمی محاسباتی شامل ...
 مشخصات نشر : تهران: آرشیا، ۱۳۹۴.
 مشخصات ظاهری : ۶۹۶ص: مصور، جدول، نمودار.
 شابک : 978-600-91919-9-4
 وضعیت فهرست نویسی : فیکای مختصر
 یادداشت : فهرست نویسی کامل این اثر در نشانی: <http://opac.nlai.ir> قابل دسترسی است
 یادداشت : کتابنامه
 شناسه افزوده : استادحسینی، نرگس، ۱۳۶۴ -
 شمار کتابشناسی ملی : ۴۱۱۶۴۸۵



شماره پروانه: ۱۰۵۰

عنوان کتاب: مبانی تئوری و کاربردی شیمی محاسباتی
 نویسندگان: صادقعلی باوفا - نرگس اسحاق حسینی
 مسؤول فنی و چاپ: کامل کریمی راد

صفحه آرا: کیانقش (حسینی لر)

لیتوگرافی: رجاء نقشینه

چاپ: سبحان

صحافی: تلاش

نوبت چاپ: اول - فروردین ۱۳۹۵

شمارگان: ۱۰۰۰ جلد

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۹۱۹۱۹-۹-۴

ناشر: انتشارات آرشیا

قیمت: ۵۰۰۰۰ تومان

کلیه حقوق برای مولف محفوظ است.

ملاحظه: درج آرم دانشگاه بین المللی چابهار
 در پشت جلد با مجوز دانشگاه می باشد.



فهرست

فصل ۱ / مبانی تئوری شیمی محاسباتی.....	۱۵
۱-۱ مقدمه.....	۱۵
۱-۱-۱ مدل‌ها، تقریب‌ها و واقعیت.....	۱۵
۱-۲ چگونه شیمی محاسباتی استفاده شده است.....	۱۶
۲ قوانین نهایی.....	۱۹
۱-۲-۱ انرژی.....	۲۳
۲-۱ الکتروستاتیک.....	۲۴
۳-۲-۱ واحدهای اتمی.....	۲۴
۴-۲-۱ سیستم یک.....	۲۴
۱-۴-۲-۱ سیستم بین‌المللی.....	۲۴
۲-۴-۲-۱ سیستم هارتری.....	۲۴
۵-۲-۱ ترمودینامیک.....	۲۴
۶-۲-۱ مکانیک کوانتومی.....	۲۵
۷-۲-۱ مکانیک آماری.....	۲۸
۳-۱ روش‌های آغازین (Ab initio).....	۳۲
۱-۳-۱ تقریب هارتری فاک.....	۳۳
۲-۳-۱ همبستگی.....	۳۶
۳-۳-۱ نظریه‌ی اختلال MØLLER-PLESSET.....	۳۸
۴-۳-۱ برهم‌کنش آرایشی (CI).....	۴۰
۵-۳-۱ SCF چند آرایشی.....	۴۰
۶-۳-۱ برهم‌کنش آرایشی چند مرجعی (MRCI).....	۴۲
۷-۳-۱ خوشه جفت شده.....	۴۲
۸-۳-۱ روش مونت کارلوی کوانتومی.....	۴۳
۹-۳-۱ اوربیتال‌های طبیعی.....	۴۵
۱۰-۳-۱ خاتمه.....	۴۶
۴-۱ روش‌های نیمه تجربی.....	۴۷

- ۴۸..... ۱-۴-۱..... هوکل
- ۴۸..... ۲-۴-۱..... هوکل توسعه یافته
- ۴۹..... ۳-۴-۱..... PPP
- ۴۹..... ۴-۴-۱..... CNDO
- ۵۰..... ۵-۴-۱..... MINDO
- ۵۰..... ۶-۴-۱..... MNDO
- ۵۱..... ۷-۴-۱..... INDO
- ۵۱..... ۸-۴-۱..... ZINDO
- ۵۲..... ۹-۴-۱..... SINDO1
- ۵۲..... ۱۰-۴-۱..... PRDDO
- ۵۳..... ۱۱-۴-۱..... AM1
- ۵۳..... ۱۲-۱-۱..... PM3
- ۵۴..... ۳-۴-۱..... PM3 TM
- ۵۴..... ۱۴-۴-۱..... FE-SKE-IAL
- ۵۵..... ۱۵-۴-۱..... MNDO
- ۵۵..... ۱۶-۴-۱..... SAM1
- ۵۵..... ۱۷-۴-۱..... تئوری گوسین
- ۵۷..... ۱۸-۴-۱..... توصیه‌ها
- ۵۷..... ۵-۱- نظریه‌ی تابعی چگالی
- ۵۷..... ۱-۵-۱..... نظریه‌ی اساسی
- ۵۹..... ۲-۵-۱..... تکنیک‌های مقیاس‌گذاری خطی
- ۶۱..... ۳-۵-۱..... ملاحظات عملی
- ۶۳..... ۴-۵-۱..... توصیه‌ها
- ۶۳..... ۶-۱- پیش‌بینی هندسه‌ی مولکولی
- ۶۳..... ۱-۶-۱..... تعیین هندسه‌ی مولکولی
- ۶۴..... ۲-۶-۱..... سیستم ثابت- خط ورودی- مولکولی ساده شده (SMILES)
- ۶۵..... ۱-۲-۶-۱..... مجموعه اصطلاحات
- ۶۶..... ۲-۲-۶-۱..... تعریف مبتنی بر گراف
- ۶۷..... ۳-۲-۶-۱..... مثال‌ها
- ۷۱..... ۵-۲-۶-۱..... کاربرد در برخی مولکول‌ها
- ۷۲..... ۶-۲-۶-۱..... مثال‌های دیگری از SMILES

فهرست مطالب

۷۲	۷-۲-۶-۱ توسعه‌ها.....
۷۲	۸-۲-۶-۱ تبدیل.....
۷۳	۳-۶-۱ ساختن هندسه.....
۷۴	۴-۶-۱ مختصات فضایی برای بهینه‌سازی.....
۷۶	۵-۶-۱ الگوریتم بهینه‌سازی.....
۷۷	۶-۶-۱ سطح نظری.....
۷۸	۷-۶-۱ توصیه‌ها.....
۷۸	۷-۱ ساخت یک Z-matrix.....
۷۹	۱-۷ Z-matrix برای مولکول دواتمی.....
۷۹	۲- Z-matrix برای مولکول چنداتمی.....
۸۰	۳-۷-۱ مدارهای خطی.....
۸۱	۴-۷-۱ سیستم‌های حلقه‌ای.....
۸۲	۸-۱ ارتعاشات مولکولی.....
۸۳	۱-۸-۱ تقریب سازگار همگی.....
۸۶	۲-۸-۱ فرکانس‌های ناهمبند.....
۸۷	۳-۸-۱ شدت پیک.....
۸۸	۴-۸-۱ انرژی نقطه صفر و تصحیحات بر دینامیک.....
۸۸	۹-۱ اهمیت تقارن.....
۹۱	۱-۹-۱ تقارن تابع موج.....
۹۱	۲-۹-۱ ساختارهای انتقالی.....
۹۱	۱۰-۱ استفاده‌ی مؤثر از منابع کامپیوتری.....
۹۲	۱-۱۰-۱ پیچیدگی زمانی.....
۹۶	۲-۱۰-۱ هزینه‌ی کار.....
۹۷	۳-۱۰-۱ کامپیوترهای موازی.....
۹۸	۱۱-۱ چگونگی مدیریت یک پروژه‌ی تحقیقات محاسباتی.....
۱۰۶	۱۲-۱ مختصات واکنش.....
۱۰۶	۱-۱۲-۱ مسیر مینیم انرژی.....
۱۰۸	۲-۱۲-۱ سطح نظری.....
۱۰۹	۳-۱۲-۱ مسیر حداقل حرکت.....
۱۰۹	۴-۱۲-۱ روش‌های متعادل‌سازی.....
۱۱۰	۵-۱۲-۱ دینامیک واکنش.....

- ۱۱۱-۱۳ سطوح انرژی پتانسیل..... ۱۱۱
- ۱-۱۳-۱ حواص سطوح انرژی پتانسیل..... ۱۱۱
- ۱-۱۳-۲ محاسبات سطوح انرژی پتانسیل..... ۱۱۳
- ۱-۱۳-۳ تطابق نتایج PES با معادلات تحلیلی..... ۱۱۴
- ۱-۱۳-۴ تطابق نتایج PES با مدل های نیمه تجربی..... ۱۱۶
- ۱۴-۱ سفارشی سازی مجموعه پایه..... ۱۱۶
- ۱-۱۴-۱ ایجاد مجموعه های پایه از SCRATCH..... ۱۱۷
- ۲-۱۴-۱ ترکیب مجموعه های پایه ی موجود..... ۱۱۸
- ۳-۱۴-۱ سفارشی کردن یک مجموعه پایه..... ۱۱۹
- ۴-۱۴-۱ خطای انطباق مجموعه پایه..... ۱۲۵
- ۱۲۶-۱۵ QM/MM..... ۱۲۶
- ۱۵-۱ روش غ. خودکار..... ۱۲۶
- ۱-۱۵-۲ تقییم بندی، انرژی..... ۱۲۷
- ۱-۱۵-۳ مدرالس..... ۱۲۷
- ۱-۱۵-۲ بار..... ۱۲۸
- ۱-۱۵-۳ توصیف پیوندها، بیر نواحی..... ۱۲۸
- ۱-۱۵-۴ قطیش..... ۱۲۸
- ۱-۱۵-۵ جهت یابی مجدد..... ۱۲۹
- ۱-۱۵-۶ شرایط مرزی..... ۱۲۹
- ۱-۱۵-۳ تفریق انرژی..... ۱۲۹
- ۱-۱۵-۴ روش خودسازگار..... ۱۳۱
- ۱۶-۱ بسته های نرم افزاری..... ۱۳۱
- ۱-۱۶-۱ بسته های نرم افزاری موجود..... ۱۳۲
- ۱-۱۶-۱ Chem3D..... ۱۳۲
- ۱-۱۶-۲ اسپارتان..... ۱۳۶
- ۱-۱۶-۳ GAMESS..... ۱۳۷
- ۱-۱۶-۴ گوسین..... ۱۳۸
- ۱۷-۱ گریزی کوتاه به تئوری..... ۱۴۱
- ۱-۱۷-۱ پیوند کووالانسی..... ۱۴۱
- ۱-۱۷-۲ پیوند داتیو..... ۱۴۳
- ۱-۱۷-۳ پیوند هیدروژنی (نوع خاصی از پیوندهای دوقطبی - دوقطبی)..... ۱۴۴

۱۴۵	۱-۳-۱۷-۱ فواصل و زوایا
۱۴۶	۲-۳-۱۷-۱ طبقه‌بندی پیوندهای هیدروژنی
۱۴۷	۳-۳-۱۷-۱ تفاوت پیوند هیدروژن-هیدروژن و پیوند دو هیدروژن
۱۴۸	۴-۱۷-۱ پیوند یونی (الکترووالانسی)
۱۴۹	۵-۱۷-۱ نظریه‌ی اتم‌ها در مولکول‌ها (AIM)
۱۴۹	۱-۵-۱۷-۱ فرضیه‌ی اتم
۱۵۱	۲-۵-۱۷-۱ تعریف هندسه‌ی فضایی اتم
۱۵۲	۳-۵-۱۷-۱ تعریف اتم در تئوری اتم در مولکول
۱۵۳	۴-۵-۱۷-۱ تعریف پیوند
۱۵۹	۵-۵-۱۲-۱ تشخیص نوع پیوند با توجه به توصیفگرهای AIM
۱۶۰	۶-۱۷-۱ اصل اهر، بیتال پیوندی طبیعی (NBO)
۱۶۲	۷-۱۷-۱ خطای انطباق مجموعه پایه (BSSE)

فصل ۲ / محاسبات گویا تحت واکس

۱۶۳	۱-۲ تاریخچه‌ی سیستم عامل لینوکس
۱۶۴	۲-۲ توزیع‌های لینوکس
۱۷۰	۳-۲ روش‌های نصب لینوکس
۱۷۱	۱-۳-۲ آموزش نصب VMware Workstation
۱۷۸	۲-۳-۲ ایجاد سیستم مجازی برای نصب لینوکس
۲۰۵	۳-۳-۲ نصب سیستم عامل لینوکس OpenSuSE

فصل ۳ / آموزش نرم‌افزارهای طراحی و محاسباتی شیمی تحت لینوکس و نرم‌افزار کم‌آفیس

۲۱۵	(Chem Office)
۲۱۵	۱-۳ معرفی نرم‌افزار کم‌آفیس (ChemOffice)
۲۱۵	۱-۱-۳ معرفی کلیدهای کاربردی (Chem3D Ultra)
۲۱۶	۲-۳ رسم ساختار ساده‌ی مولکول در (Chem3D Ultra)
۲۱۷	۳-۳ محاسبات MOPAC با ChemOffice
۲۱۸	۴-۳ طراحی ساختار پیچیده توسط نرم‌افزار ChemDraw
۲۲۱	۵-۳ رسم NMR
۲۲۱	۶-۳ محاسبات Chem3D (ویژه‌ی محاسبات QSAR و QSPR)
۲۲۳	۷-۳ قرار دادن دو مولکول در کنار هم

- ۲۲۶..... ۸-۳ ساختن فایل ورودی گوسین
- ۲۳۰..... ۹-۳ اجرا (RUN) گوسین
- ۲۳۳..... ۱۰-۳ GaussView
- ۲۳۵..... ۱۱-۳ تبدیل فایل خروجی گوسین به فایل ورودی گوسین
- ۲۳۶..... ۱۲-۳ انواع فایل‌های ورودی
- ۲۳۷..... ۱۳-۳ دستورات گوسین
- ۲۳۷..... ۱-۱۳-۳ Opt یا fopt (بهینه‌سازی)
- ۲۳۷..... ۲-۱۳-۳ Freq
- ۲۳۸..... ۳-۱۳-۳ روش‌های مختلف برای تشخیص درست بودن جواب‌های دستور Freq
- ۲۴۲..... ۴-۱۳-۱ خروجی محاسبات فرکانسی
- ۲۴۴..... ۱۴-۳ تصفیه‌ها- موجود در دستور freq
- ۲۴۴..... ۱-۱۴-۳ انرژی‌ها
- ۲۴۵..... ۱-۱۴-۳ انتالپی و انرژی‌های واکنش
- ۲۴۶..... ۳-۱۴-۳ جرم مولی (Molecular Mass)
- ۲۴۷..... ۴-۱۴-۳ قطبش‌پذیری (Polarizability)
- ۲۴۷..... ۵-۱۴-۳ به دست آوردن حالت گذار (TS)
- ۲۵۴..... ۶-۱۴-۳ راه‌های تشخیص صحیح در حالت گذار (TS)
- ۲۵۶..... ۱۵-۳ دستور prop=potential
- ۲۵۷..... ۱۶-۳ محاسبه‌ی سرعت واکنش
- ۲۵۸..... ۱۷-۳ دستور NBO
- ۲۵۸..... ۱-۱۷-۳ توصیفگرها
- ۲۵۹..... ۲-۱۷-۳ دیاگرام لوئیس
- ۲۵۹..... ۳-۱۷-۳ $E(2)$ (انرژی انتقال بار)
- ۲۶۰..... ۱۸-۳ volume (حجم مولکولی)
- ۲۶۰..... ۱۹-۳ دستور NMR
- ۲۶۱..... ۲۰-۳ مشاهده‌ی اندازه و زوایای مولکول
- ۲۶۳..... ۲۱-۳ روش‌های مجموعه پایه کامل (CBS)
- ۲۶۳..... ۱-۲۱-۳ انرژی پتانسیل یونیزاسیون (Ionization Potentials)
- ۲۶۵..... ۲-۲۱-۳ انرژی کشش الکترون (Electron affinity)
- ۲۶۵..... ۳-۲۱-۳ انرژی کشش پروتون (Proton affinity)
- ۲۶۶..... ۴-۲۱-۳ انرژی اتمیزاسیون (Atomization)

۲۶۷	scan ۲۲-۳
۲۶۷	Scan ۱-۲۲-۳ (فاصله)
۲۷۰	Scan ۲-۲۲-۳ یک زاویه‌ی دووجهی (Dihedral angle)
۲۷۲	LUMO و HOMO اوربیتال‌های
۲۷۵	GaussView 5.0 آموزش نصب نرم‌افزار
۲۸۳	رسم مولکول
۲۸۵	کلیک‌های میانبر موس
۲۹۷	مشاهده‌ی تقارن مولکول
۲۹۹	۲. مشاهده‌ی خروجی (out) گوسین
۳۰۵	۱-۲ رسم کانتور، HOMO و LUMO
۳۰۹	LUMO و HOMO ۱-۲۹-۳
۳۱۱	۳۰-۳ بدلت آوردن خطای انطباق مجموعه پایه (BSSE) دو الی سه مولکول
۳۱۴	scan ۳۱-۳ یک زاویه‌ی دووجهی
۳۱۶	۳۲-۳ فایل ورودی A M
۳۱۷	۳۳-۳ روش محاسبه‌ی سطح بیانی
۳۲۱	۱-۳۳-۳ ذخیره کردن نتایج محاسبات
۳۲۲	۲-۳۳-۳ توصیفگرها
۳۲۵	۳-۳۳-۳ محاسبه‌ی اتم‌ها
۳۲۹	۲۴-۳ رسم کانتور
۳۳۲	HyperChem v.7.0 راهنمای نصب نرم‌افزار
۳۳۵	HyperChem آموزش کاربردی هایپرکم
۳۳۵	۱-۳۶-۳ معرفی هایپرکم
۳۳۶	۲-۳۶-۳ طریقه‌ی رسم مولکول
۳۴۰	۳-۳۶-۳ ساخت فایل ورودی گوسین (gjf)
۳۴۴	Spartan آموزش ۳۷-۳
۳۴۴	۱-۳۷-۳ نصب نرم‌افزار
۳۵۱	۲-۳۷-۳ آیکون‌ها
۳۵۲	۳-۳۷-۳ رسم مولکول
۳۶۲	۱-۳-۳۷-۳ روش ساده‌ی رسم مولکول
۳۶۴	۴-۳۷-۳ محاسبات
۳۶۶	۱-۴-۳۷-۳ محاسبات IR

۳۶۸	۲-۴-۳۷-۳ مشاهده‌ی نتایج محاسبات
۳۷۰	۳-۴-۳۷-۳ مشاهده‌ی ارتعاشات فرکانس‌ها
۳۷۲	۴-۴-۳۷-۳ محاسبه‌ی NMR
۳۷۲	۵-۴-۳۷-۳ مشاهده‌ی نتایج محاسبات
۳۷۳	۶-۴-۳۷-۳ مشاهده‌ی طیف NMR
۳۷۴	۷-۴-۳۷-۳ محاسبات HOMO و LUMO
۳۷۸	۸-۴-۳۷-۳ مشاهده سطوح مولکول
۳۸۱	۳۸-۳ آموزش نرم‌افزار VEDA
۳۸۳	۱-۳۸-۲ طیف سنجی IR
۳۸۴	۱-۱-۳۸-۱ طیف و اثرات مولکولی
۳۸۵	۳-۳۸-۲ تفاوت جذب مولکول‌ها در IR و Raman
۳۸۵	۱-۲-۳۸-۳ تاثیر دما بر پیوند
۳۸۶	۲-۲-۳۸-۳ تاثیر حرارت بر آنها
۳۸۶	۳-۲-۳۸-۳ تاثیر پیرایه‌ی یون
۳۸۶	۴-۲-۳۸-۳ تاثیر نوع حرکت
۳۸۷	۵-۲-۳۸-۳ تاثیر رزونانس
۳۸۷	۳-۳۸-۳ انواع پیک در IR
۳۸۷	۴-۳۸-۳ نمایش تصویری انواع ارتعاشات کششی (stretching) و خمشی (bending)
۳۹۱	۵-۳۸-۳ آنالیز طیفی
۳۹۹	۶-۳۸-۳ تفسیر و شناسایی نوع ارتعاش Veda
۳۹۹	۳۹-۲ آموزش نصب نرم‌افزار ChemOffice Ultra 2008 11.0 FULL
۴۲۰	۱-۳۹-۳ نرم‌افزار کم‌آفیس (ChemOffice 11.0)

فصل ۴ / خطاهای گوسین

۴۲۱	۱-۴ خطای ۲۰۷۰
۴۲۱	۲-۴ پایان نرمال گوسین XX
۴۲۲	۳-۴ نوشتن نادرست
۴۲۶	۴-۴ لینک ۹۹۹۹
۴۲۸	۵-۴ زاویه‌ی آلفا خارج از محدوده‌ی معتبر از ۰ تا ۱۸۰
۴۲۹	۶-۴ خواندن پایه‌ی مرکز
۴۲۹	۷-۴ عملیات بر روی فایل خارج از محدوده

فهرست مطالب

۴-۸	انتهای فایل در GetChg	۴۳۰
۴-۹	تغییر در گروه نقطه‌ای یا جهت‌گیری استاندارد	۴۳۱
۴-۱۰	نماد اتمی ناشناخته	۴۳۲
۴-۱۱	شکست همگرایی -- اجرا خاتمه یافته است	۴۳۲
۴-۱۲	FOPT درخواست شده اما به جای این که $NVar = XX$ باشد $YY = NDOF$ اتفاق افتاده است	۴۳۳
۴-۱۳	خوانده نشدن اوربیتال‌های اشغال شده	۴۳۴
۴-۱۴	GetRSB در KLT.ge.NIJTC	۴۳۵
۴-۱۵	نماد XXX در z-matrix یافت نشود	۴۳۵
۴-۱۶	متغیر x تعدادی مراحل نامعتبر دارد	۴۳۶
۴-۱۷	مشکل افاصله‌ی ماتریس	۴۳۷
۴-۱۸	ایمپای فایل در Zsymb	۴۳۷
۴-۱۹	جستجوی بی دلیل نامعلوم صرف نظر شده است	۴۳۸
۴-۲۰	شاخص منیر ۲۰۰۰ روی کارت XXX، خارج از محدوده است، $NVar = XX$	۴۳۸
۴-۲۱	مرکز نامشخص XXX	۴۳۹
۴-۲۲	تعیین متغیرهای اتم مجازی در تبدیل z-matrix با شکست مواجه شده است	۴۴۰
۴-۲۳	malloc شکست خورده است	۴۴۰
۴-۲۴	بار و چندگانگی اسپین ناقص به نظر می‌رسد	۴۴۱
۴-۲۵	تلاش برای تعریف دوباره‌ی نماد ناشناخته XXX	۴۴۲
۴-۲۶	تضاد #۲ در MakNEB (Inconsistency #2 in MakNEB)	۴۴۲
۴-۲۷	galloc: نمیتواند حافظه اختصاص دهد	۴۴۸
۴-۲۸	خطای تعداد سیکل	۴۴۹
۴-۲۹	خطای مربوط به رفتن برق	۴۴۹
۴-۳۰	خطای انطباق مجموعه پایه BSSE (Basis Set Superposition Error)	۴۵۰

فصل ۵ / ارسال مقاله

۵-۱	آشنایی با موسسه اطلاعات علمی و مقالات (ISI)	۴۵۳
۵-۱-۱	چیست ISI؟	۴۵۳
۵-۱-۱-۱	شاخص فاکتور اثر (ضریب تاثیر یا درجه تاثیر)	۴۵۴
۵-۱-۱-۲	شاخص فوری (آنی)	۴۵۵
۵-۲	آموزش EndNote 7 (نرم افزار مدیریت اطلاعات و استنادهای علمی)	۴۵۵

- ۴۵۵.....Endnote ۱-۲-۵
- ۴۵۶.....برخی از ویژگی‌های نرم‌افزار ۲-۲-۵
- ۴۵۶.....EndNote X 7 نصب نرم‌افزار ۳-۵
- ۴۶۲.....EndNote مراحل کار با نرم‌افزار ۱-۳-۵
- ۴۶۳.....My Library منوی ۲-۳-۵
- ۴۶۷.....اضافه نمودن سبک‌های (Style) مقاله‌نویسی ۳-۳-۵
- ۴۶۸.....Google Scholar ۴-۳-۵
- ۴۷۴.....ارسال مقاله ۴-۵

- ۴۹۱.....فصل ۶ / منابع
- ۴۹۱.....۱- جدول مجوعه پایه‌ها
- ۵۰۳.....۲-۶ رفرنس [۱] [۲]
- ۶۸۲.....۳-۶ کتابنامه

مقدمه مولفین

ن والقلم و ما یسطرون

آب دریا را اگر نتوان کشید هم به قدر تشنگی باید چشید

ستایش و سپاس خداوند منان را که در پرتو لطف و عنایت بی کران او تالیف کتاب حاضر میسر شد.

رشد شتابان و روز افزاین تحصیلات تکمیلی در کشور و افزایش گرایش‌های تحصیلی در مقاطع کارشناسی ارشد و دکتری سبب شده تا نظام آموزشی دانشگاه‌ها هرزگاهی در موارد و مواد مختلف از این رشد عقب بماند. یکی از مواردی که عقب ماندگی سیستم آموزشی در آن آشکار است وجود منابع مصدعانه‌ای جهت دانشجویان می‌باشد که منابع مطالعاتی شخصی ندارند. با آن‌که این منابع کاستی‌ها و اطلاعات مناسب به دانشجویان یا پژوهشگر نمی‌دهد یا آن‌که اطلاعات پراکنده بوده و دانشجویان در دانشگاه‌های با سیستم تحصیلی نیمه حضوری دچار سردرگمی بیشتر می‌شود.

مجموع این مباحث مولفین این کتاب را بر آن داشت تا اقدام به تالیف این کتاب بنمایند. کتاب پیش روی شما به سه مبحث مبانی تئوری شیمی محاسباتی، محاسبات در سیستم عامل لینوکس و ویندوز تقسیم می‌شود. در این کتاب سعی شده تا مبانی تئوری شیمی محاسباتی به صورت بسیار ساده، قابل فهم و تا حد امکان دور از فرمول‌های سنگین و پیچیده ریاضی بیان گردد. دانشجویان می‌توانند با مطالعه این بخش مفهوم جامع و قابل فهمی از شیمی محاسباتی داشته باشند.

در مبحث بعدی به مشکل سرعت انجام محاسبات گوسین که گریبان‌گیر اکثر دانشجویان و محققین می‌باشد پرداخته‌ایم. فلسفه تئوری Gaussian بر این پایه استوار است، که مدل‌های تئوری باید برای همه سیستم‌های مولکولی با هر اندازه و نوعی به طور یکسان قابل اجرا باشند. مدل‌های شیمیایی در Gaussian از ترکیب روش‌های تئوری با مجموعه‌های پایه حاصل شده‌اند. نرم‌افزار Gaussian قادر به پیش‌بینی خواص بسیاری از

مولکول‌ها و واکنش‌ها می‌باشد. در سیستم عامل لینوکس جهت انجام محاسبات می‌توانید از تمام cpuهای موجود در سیستم استفاده کنید، اما در ویندوز فقط از یک cpu استفاده می‌شود. در این کتاب به آموزش گوسین نسخه ۰۳ و ۰۹ که هم دارای قابلیت پردازش موازی برای سیستم‌های با CPU چند هسته‌ای است و هم سیستم‌هایی با مادربرد Multiprocessor، به عنوان مثال در صورت نصب بر روی یک کامپیوتر شخصی با یک CPU چهار هسته‌ای Core2Quad یا QuadCore سرعت اجرای برنامه شما چهار برابر می‌شود.

در مبحث ویندوز به آموزش نرم‌افزارهای طراحی و محاسباتی نظیر Gaussian, GaussViwe, Chemoffice, Hyperchem, Spartan, NBO, VED, AIM پرداخته شده است.

در انتهای کتاب جهت رطرف شدن خطاهای ممکن در گوسین به همراه راه حل و نمونه مثال پرداخته شده است. این کتاب می‌تواند برای دانشجویان مقطع کارشناسی، کارشناسی ارشد و دکتری رشته‌های مختلف علوم و مهندسی که علاقمند به آموزش مباحث بنیادی و کاربردی شیمی محاسباتی می‌باشند، مورد استفاده قرار گیرد. به طور قطع کتاب حاضر عاری از اشتباه و نقص نمی‌باشد. بدین سبب از کلیه خوانندگان تقاضا می‌شود ما را از ایرادات کتاب و نظرات خود مطلع فرمایند. با در چاپ‌های بعدی مورد استفاده قرار گیرد. جای دارد، از همه عزیزانی که در ثمر رساندن این کتاب سهم داشته‌اند کمال قدردانی و تشکر را نماییم. سپاس آخر را به مهربان‌ترین همراهان، زندگی‌مان، پدر و مادر عزیزمان تقدیم می‌کنیم که حضورشان در فضای زندگی‌مان مصداق بی‌پایانی سخاوت بوده است. جهت دریافت نرم‌افزارهای موجود در کتاب، مشخصات فرد را به آدرس ایمیل ذیل ارسال کنید.

s.ali.bavafa@Chemical.com