

شیمی آلی محاسباتی

(شکستن سدّ محدودیت‌های آزمایشگاهی و دستیابی
به ویژگی مولکول‌های آلی و نانو ساختارها)

مؤلفان:

محمد زمان کسایی

حسن زودی

بهزاد کوشی

مهدی قمبریان

۱۳۹۳



عنوان و نام پدیدآور: شیمی آلی محاسباتی (شکستن سد محدودیت‌های آزمایشگاهی و

دستیابی به ویژگی مولکول‌های آلی و نانو ساختارها)

مشخصات نشر: تهران: دانشگاه تربیت مدرس، مرکز نشر آثار علمی، ۱۳۹۳.

مشخصات ظاهری: ۲۲۷ص: مصور، جدول.

شابک: ۹۷۸۶۰۰۷۵۸۹۱۰۶

وضعیت فهرست نویسی: فبیای مختصر

یادداشت: این مدرک در آدرس <http://opac.nlai.ir> قابل دسترسی است.

یادداشت: مؤلفان محمدزمان کسایی، حسن زندی، بهزاد کوشکی، مهدی قمبریان.

شناسه افزوده: کسایی، محمدزمان

شناسه افزوده: دانشگاه تربیت مدرس. مرکز نشر آثار علمی

شناسه افزوده: Tarbiat Modares University. TMU Press

شماره کتابشناسی ملی: ۳۷۶۹۹۳۵

شیمی آلی محاسباتی

(شکستن سد محدودیت‌ها، آزمایشگاهی و دستیابی به ویژگی مولکول‌های آلی و نانو ساختارها)

نگارندگان: محمدزمان کسایی / حسن زندی / بهزاد کوشکی / مهدی قمبریان

ویراستار ادبی و فنی: زهرا نایع

مراح جلد: ترنج

موضوع: تک‌آرا

شماره ۱: ۱۸۵

شماره ۲: ۲۱۱

تاریخ انتشار: ۱۳۹۳

شمارگان: ۵۰۰

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۷۵۸۹-۱۰-۶ ISBN: 978-600-7589-10-6

ناشر: مرکز نشر آثار علمی دانشگاه تربیت مدرس

نوبت چاپ: اول

کارشناس اجرایی: فریبا کرمانی

ناظر چاپ: مصطفی جانجانی

لیتوگرافی: ایران گرافیک

چاپ و صحافی: آفتاب

مرکز پخش: تقاطع بزرگراه‌های آلاحمد و دکتر چمران،

دانشگاه تربیت مدرس، مرکز نشر آثار علمی، صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۳۱۸

تلفن: ۸۲۸۸۳۰۹۶ دورنگار: ۸۲۸۸۳۰۳۲

بها: ۱۸۰۰۰۰ ریال

صحت مطالب کتاب بر عهده نگارندگان است.

فهرست مطالب

پیشگفتار نگارندگان ز

فصل اول: مفاهیم اساسی شیمی محاسباتی و پیشینه آن ۱

۱-۱ شیمی محاسباتی ۱

۲-۱ معرفی سیستم ۳

۳-۱ روش‌های محاسباتی و تعاریف مربوطه ۴

۱-۳-۱ روش‌های آغازین ۴

۱-۳-۱-۱ روش‌های همبستگی الکترونی ۵

۲-۳-۱-۲ روش‌های اتمی ۵

۲-۳-۱ روش‌های نیمه‌تجرب ۶

۳-۳-۱ روش‌های تابعیت چگالی الکترون ۶

۴-۳-۱ روش‌های مکانیک مولکولی ۷

۵-۳-۱ روش دینامیک مولکولی ۸

۶-۳-۱ روش مونت کارلو ۹

۴-۱ مفاهیم اساسی شیمی محاسباتی ۱۰

۱-۴-۱ مجموعه توابع پایه ۱۰

۲-۴-۱ مجموعه پایه دارای توابع قطبی‌کننده ۱۰

۳-۴-۱ مجموعه پایه‌های ظرفیتی شکافته ۱۱

۴-۴-۱ مجموعه پایه همبستگی سازگار ۱۱

۵-۴-۱ مجموعه پایه دارای توابع نفوذی ۱۲

۶-۴-۱ مجموعه‌های پایه برای اتم‌های سنگین ۱۲

۷-۴-۱ تحلیل اوربیتال‌های پیوندی طبیعی (NBO) ۱۲

۸-۴-۱ Z-matrix ۱۳

۱۴	۵-۱ جابه‌جایی‌های شیمیایی مستقل از هسته (NICS)
۱۵	۶-۱ واکنش‌های ایزودسمیک و همودسمیک
۱۵	۷-۱ قدرت الکترون دوستی و هسته دوستی
۱۶	۸-۱ آشنایی با نرم‌افزار گوسین و نحوه کاربرد آن
۱۹	۹-۱ شیمی مدل
۱۹	۱-۹-۱ روش‌های محاسباتی در نرم‌افزار گوسین
۲۱	۲-۹-۱ مجموعه‌های پایه در گوسین
۲۱	۳-۹-۱ افزودن توابع قطبش و نفوذی در گوسین
۲۳	مراجع

فصل دوم: هایپرکم

۲۷	۱-۲ معرفی
۲۸	۲-۲ نحوه استفاده از نرم افزار
۳۲	۳-۲ معرفی دیگر گزینه‌های کاربردی
۳۴	۴-۲ مشاهده مشخصات اتم‌ها و پیوندها
۳۶	۵-۲ محاسبات در هایپرکم
۳۹	۶-۲ پایگاه اطلاعاتی
۴۱	۷-۲ ساخت فایل ورودی گوسین در هایپرکم
۴۵	۸-۲ پنجره ویرایش دستورات محاسباتی گوسین
۵۰	مراجع

فصل سوم: گوس و یو

۵۱	۱-۳ معرفی
۵۲	۲-۳ نحوه استفاده از نرم‌افزار و قراردادن عناصر و قطعه‌های مولکولی
۵۳	۱-۲-۳ Element منوی
۵۶	۲-۲-۳ منوی حلقه‌ها
۵۸	۳-۳-۳ R-Group منوی
۵۹	۴-۳-۳ Bio منوی
۶۰	۱-۴-۳-۳ شناور نگاه‌داشتن منوها بر صفحه
۶۰	۵-۳-۳ Custom منوی
۶۰	۶-۳-۳ منوی پیوند (Bond)
۶۲	۷-۳-۳ منوی زاویه پیوندی (Angle)

۶۲	 ۸-۳-۳ منوی زاویه‌ی دووجهی (Dihedral)
۶۳	 ۹-۳-۳ کلید بررسی کردن مولکول (Inquire)
۶۵	 ۱۰-۳-۳ کلید Add Valence
۶۵	 ۱۱-۳-۳ کلید Delete Atom
۶۵	 ۱۲-۳-۳ کلید Invert about atom
۶۶	 ۱۳-۳-۳ منوی New
۶۷	 ۱۴-۳-۳ کلید عکس گرفتن
۶۷	 ۱۵-۳-۳ کلید گروه نقطه‌ای
۶۸	 ۱۶-۳-۳ منوی Atom List Editor
۶۸	 ۱۷-۳-۳ کلید لایه‌بندی
۷۰	 ۱۸-۳-۳ منوی شرایط تناوبی مرزی PBC (شکله‌ی بلوری)
۷۱	 ۱۹-۳-۳ Molecular Orbital Editor
۷۲	 ۲۰-۳-۳ منوی Add View of Molecule Group
۷۲	 ۲۱-۳-۳ کلید Center
۷۲	 ۲۲-۳-۳ پنجره Display Format
۷۵	 ۲۳-۳-۳ پنجره محاسبه، گوین (Gaussian Calculation Setup)
۸۳	 ۱-۲۳-۳-۳ دستور OM Or
۸۴	 ۲۴-۳-۳ کلید راه اندازی سری
۸۴	 ۴-۳ تبدیل فایل خروجی گوین به فایل ورودی گوین
۸۴	 ۵-۳ کنار هم قراردادن مولکول‌ها در یک پنجره
۸۵	 ۶-۳ چاپ کردن تصویر ساختارهای مولکولی
۸۶	 ۷-۳ تبدیل شکل هندسی ساختارهای مولکولی به فایل عکس
۸۹	 مراجع
۹۱	 فصل چهارم: کاربرد عملی هایپرکم، گوس‌ویو و گوین
۹۲	 ۱-۴ فولرن یا C ₆₀
۹۵	 ۲-۴ سیکلاسن
۹۶	 ۳-۴ گرافن
۹۷	 ۴-۴ نانولوله
۹۸	 ۱-۴-۴ نانوتیوب زیگزاگی
۹۸	 ۲-۴-۴ نانوتیوب آرمچیر
۹۹	 ۳-۴-۴ نانوتیوب‌های کایرال

۱۰۰	۵-۴ انواع محاسبات و دستورات محاسباتی
۱۰۳	۱-۵-۴ یکتایی لایه بسته
۱۰۳	۲-۵-۴ یکتایی لایه باز
۱۰۴	۳-۵-۴ سه‌تایی لایه باز
۱۰۵	۶-۴ واژه‌های کلیدی دستورات محاسباتی گوسین (Keywords)
۱۰۵	۱-۶-۴ بهینه‌سازی
۱۰۶	۲-۶-۴ انرژی تک‌نقطه
۱۰۷	۳-۶-۴ فرکانس
۱۱۳	۱-۶-۴ تطبیق پذیری
۱۱۴	۵-۴ محاسبات اوربیتال‌های مولکولی (HOMO & LUMO)
۱۱۶	۶-۴ محاسبات NBO
۱۱۸	۷-۶-۴ حجم مولکول
۱۱۹	۸-۶-۴ دستور NMR
۱۲۰	۹-۶-۴ جابه‌جایی شیمیایی مستقل از هسته (NICS)
۱۲۳	۱۰-۶-۴ محاسبات در شرایط دبی و فشار مختلف (Temperature & Pressure)
۱۲۳	۱۱-۶-۴ محاسبات در فاز حلال
۱۲۵	۱۲-۶-۴ محاسبات حالت‌گذار
۱۳۰	۱۳-۶-۴ روش‌های مجموعه پایه کامل (CBS)
۱۳۱	۱۴-۶-۴ انرژی یونش
۱۳۲	۱۵-۶-۴ انرژی الکترون‌خواهی
۱۳۳	۱۶-۶-۴ انرژی پروتون‌خواهی
۱۳۳	۱۷-۶-۴ انرژی اتمیزاسیون
۱۳۴	۱۸-۶-۴ روش اسکن کردن
۱۴۰	۷-۴ محاسبات AIM
۱۵۴	مراجع

فصل پنجم: اسپار تان ۱۵۹

۱۵۹	۱-۵ معرفی
۱۶۰	۲-۵ آشنایی با منوهای اصلی
۱۶۴	۱-۲-۵ جستجوی کنفورمرها
۱۷۳	۲-۲-۵ بهینه‌کردن مولکول و استخراج اطلاعات مربوط به آن

۱۸۱	۳-۵ بررسی توتومرها
۱۸۲	۴-۵ بررسی متوهای دیگر Spartan
۱۸۲	۱-۴-۵ File منوی
۱۸۳	۲-۴-۵ Edit منوی
۱۸۵	۳-۴-۵ Model منوی
۱۸۹	۴-۴-۵ Geometry منوی
۱۹۱	۵-۴-۵ Build منوی
۱۹۸	مراجع
۱۹۹	واژه نامه فارسی به انگلیسی
۲۰۳	واژه نامه انگلیسی به فارسی
۲۰۷	نمایه

پیشگفتار نگارندگان

با توجه به روند رو به رشد پذیرش دانشجویان کارشناسی ارشد و دکتری در دانشگاه‌ها و پیشرفت‌های کشورهای می‌توان به اهمیت پژوهش و تولید علم پی برد. امروزه علم با سرعت بسیار زیاد و در ابعاد مختلف در حال پیشرفت و گسترش است. علم شیمی در مقایسه با دیگر علوم پایه، هنوز باقی مانده اما با بهره‌گیری از دیگر علوم و پیشرفت‌های دستگاهی و کامپیوتری در پنجاه سال اخیر رشد فوق‌العاده چشم‌گیری به‌خصوص در کشورهای صنعتی داشته است. از آنجایی که برای پژوهش در بیشتر علوم به شناخت خواص و ویژگی‌های مواد مختلف احتیاج است، بنابراین علم شیمی در رشد بسیاری یک کشور نقش کلیدی و زیربنایی دارد. خوشبختانه علم شیمی در کشور ما به‌واسطه استادیان برجسته، پژوهشگران و دانشجویان ممتاز در سال‌های اخیر، پیشرفت چشمگیری داشته است.

شیمی به‌واسطه پیشرفت کامپیوتر و نرم‌افزارهای کوانتومی در دو دهه اخیر به‌ویژه در زمینه شیمی محاسباتی پیشرفت قابل ملاحظه‌ای داشته است. پس می‌توان یک شاخه جدید به علم شیمی تحت این عنوان اضافه کرد. با استفاده از توانمندی محاسباتی که روزبه‌روز، به تعدادشان افزوده و کاربردشان آسان‌تر می‌شود، می‌توان خواص، کمیت‌های محاسبه و با یکدیگر مقایسه کرد. از این‌رو استفاده از این نرم‌افزارها به‌دلیل جایگزینی و کاربری ساده آن در رشته‌های شیمی آلی، شیمی معدنی، شیمی فیزیک، بیوشیمی، یوژنیک، علوم دارویی، فیزیک، نانو و ... کاربرد روزافزونی یافته است. بررسی دقیق ساختارهای اتمی، مولکولی و سازوکار واکنش‌ها و نوآوری‌ها، بررسی ساختارهای حالت برانگیخته، به‌دست آوردن شکل و انرژی اربیتال‌های مولکولی، هیبریداسیون و بار اتمی دقیق اتم‌ها، اندازه‌گیری کمی و مقایسه آروماتیسیته برای انواع حلقه‌های آروماتیک در مولکول‌های آلی، معدنی، بیولوژیکی، دارویی، نانومواد و حتی در ساختارهای حالت‌گذار و بسیاری از موارد دیگر تنها قسمتی از کاربرد منحصر به فرد شیمی محاسباتی است.

دانش پایه‌ای شیمی، کامپیوتر خانگی با قدرت مناسب و نرم‌افزارهای مربوطه، سه عامل بسیار مهم برای پژوهش در زمینه شیمی محاسباتی است. این نوع پژوهش می‌تواند در کنار آزمایش‌های تجربی و به‌عنوان تکمیل‌کننده باشد یا به‌صورت مستقل و کاملاً تئوری انجام شود. به‌همین دلیل محققان زیادی به این نوع پژوهش روی آورده‌اند. در سال‌های اخیر، کتاب‌های مختلفی در این زمینه منتشر شده است که هر کدام به بررسی جنبه‌های مختلف شیمی محاسباتی پرداخته است؛ اما در این کتاب سعی شده است که ضمن توضیح ساده و مختصر مطالب با ارائه مثال‌های حل‌شده، رویکرد کاربردی و پژوهشی داشته باشد. این کتاب ابتدا به آموزش قدم به قدم نرم‌افزارهای هاپیرکم، گوسین، گوس‌ویو و اسپارتان می‌پردازد و سپس با ارائه مثال‌های ده، کاربردهای آن‌را به نمایش می‌گذارد. همچنین در پایان هر فصل تمرین‌هایی برگرفته از مقالات علمی ISI به همراه جواب گنجانده شده است که برخی از کاربردهای پژوهشی مطالب داخل فصل را نشان می‌دهد. افزون بر این، مراجع تمامی شکل‌های فصل اول، در پایان فصل آورده شده است و نیز فصول (۲، ۳، ۴ و ۵) مربوط به نگارندگان کتاب است که شکل‌ها و نمودارها مستخرج از نرم‌افزارهای مربوطه (ذکر شده در کتاب) می‌باشند و از هیچ کتاب یا منبعی گرفته نشده است.

امید است این کتاب برای علاقمندان و دانشجویان مفید واقع شود.

محمدزمان کسایی

حسن زندی

بهمن کاشکی

مهدی آقایی