

بسم الله الرحمن الرحيم

مبانی شبیه‌سازی‌های اتمی و مولکولی برای دانش آموزان پژوهشگر

تالیف و گردآوری :

مهندس پایه، محمد قاسم نژاد، ولی شکری

انتشارات درخت بلورین

تهران - ۱۳۹۹

سرشناسه	بایسته، محمد، ۱۳۸۲-
عنوان و نام پدیدآور	مبانی شبیه سازی های اتمی و مولکولی برای دانش آموزان پژوهشگر / تألیف و گردآوری محمد بایسته، محمد قاسم نژند، ولی شکر.
مشخصات نشر	تهران: درخت بلورین، ۱۳۹۹.
مشخصات ظاهری	۳۹ ص.: مصور (رنگی).
شابک	۹۷۸-۹۶۴-۹۹۸۵۶۱-۹ : ۵۵۰۰۰۰ ریال
وضعیت فهرست نویسی	فیبا
یادداشت	کتابنامه: ص. ۳۹.
موضوع	نرم افزار گاوسی، Gaussian، نرم افزار گاوس ویو، Gaussview، شیمی -- داده پردازی
موضوع	Chemistry -- Data processing، مولکول ها -- الگوها -- نرم افزار
موضوع	Molecules -- Models -- Software، دینامیک مولکولی -- شبیه سازی کامپیوتری
موضوع	Molecular dynamics -- Computer simulation
شناسه افزوده	قاسم نژند، محمد، ۱۳۶۷-
شناسه افزوده	شکر، ولی، ۱۳۵۹ -
رده بندی کنگره	۵۷۸ (C)
رده بندی دیویی	۰۰۶
شماره کتابشناسی ملی	۷۳۳۷۰۲۵:



انتشارات است بایسته

مبانی شبیه سازی های اتمی و مولکولی برای دانش آموزان پژوهشگر

تألیف و گردآوری: محمد بایسته، محمد قاسم نژند، ولی شکر

طراحی روی جلد: ولی شکر

چاپ، حروفچینی و صحافی: حجم ۱۲

این کتاب در یک هزار نسخه به چاپ رسید.

کلیه حقوق و اقتباس از اثر برای ناشر محفوظ است

چاپ اول: ۱۳۹۹	قیمت: ۵۵ هزار تومان
شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۹۹۸۵۶۱-۹	ISBN: ۹۷۸-۹۶۴-۹۹۸۵۶۱-۹
آدرس - تهران میدان انقلاب جنب سینمای پارس پاساژ پارس همکف پلاک ۱۲، چاپ حجم سبز	
تلفن: ۰۲۱۶۶۵۷۵۰۷۱ - ۰۹۳۵۴۰۶۸۰۱۳	

مساله از آنجا شروع می‌شود که شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به بیش از یک مکمل برای آزمایش‌های تجربی تبدیل می‌شود. شبیه‌سازی یا مدل‌سازی‌های رایانه‌ای به عنوان یک آزمایشگاه مجازی که هزینه‌ها را بسیار پایین می‌آورد و آزمایشگاهی که محدودیت‌های آزمایشگاه‌های تجربی را ندارد، امروزه جایگاه انکار نشدنی در پژوهش‌های گوناگون جهان دارد. با این هدف که بتوانیم دانش‌آموزان را کم‌کم با پژوهش‌هایی که در دانشگاه‌ها صورت می‌گیرد آشنا کنیم تصمیم گرفتیم که برای دانش‌آموزان علاقمند و مستعد، یک آزمایشگاه مجازی در حوزه فناوری فراهم کنیم. براساس آشنایی با آزمایشگاه‌های محاسباتی فیزیک سطح که در دانشگاه امیرکبیر توسط استاد بزرگوارم خانم دکتر مرصوسی برایمان حاصل شده بود؛ توانستیم اولین آزمایشگاه محاسباتی نانو فناوری کشور در مقیاس دانش‌آموزی را در پژوهشسرای زکریای رازی شهرری با حمایت‌های مدیریت محترم آن مرکز، آقای ولی‌شکر در زمستان سال ۱۳۹۷ راه اندازی کنیم.

این کتاب به جهت نبودن منبعی در حوزه نانو محاسبات که مناسب دانش‌آموزان باشد با همکاری دانش‌آموزان توانمندم از مدرسه موفقیان آقای محمدباسته گردآوری و

ترجمه شده است. امید دارم که این کوشش شروعی برای گسترش این حوزه‌ی ارزشمند
در میان مدارس کشور عزیزمان باشد.

درپناه حق / محمد قاسم‌نژند

www.ketab.ir