

نگرشی بر گوسین ۰۹ و متریال استودیو

رویا احمدی

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران یادگار امام خمینی (ره) شهری

محمدرضا جلالی سروستانی

عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهری

نشر علمی و دانشگاهی دانشگاه آزاد اسلامی

انتشارات دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران یادگار امام خمینی (ره) شهری

۱۳۹۹

سرشناسه
عنوان و نام پدیدآور
مشخصات نشر
مشخصات ظاهری
شابک
وضعیت فهرست‌نویسی
یادداشت
موضوع
Gaussian
نرم افزار متریالز استودیو
Materials Studio (Computer software)
اوربیتالهای مولکولی -- داده‌پردازی
Molecular orbitals -- Data processing
دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری
Molecular dynamics -- Computer simulation
شناسه انوده
رده‌بندی کنگره
رده‌بندی دیویی
شماره کتابشناسی ملی

احمدی، رویا، ۱۳۵۱ -
نگرشی به گوسین ۰۹ و متریال استودیو/ مولف رویا احمدی، محمدرضا جلالی سروسناتی.
شهری: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد یادگار امام خمینی (ره)، ۱۳۹۹.
۲۲۵ص: مصور (بخشی رنگی)، نمودار (بخشی رنگی).
۹۷۸-۹۶۴-۱۰-۶۳۰۷-۰
فیا
کتابنامه: ص. [۲۲۳] - ۲۲۵.
نرم افزار گاوسی
نرم افزار متریالز استودیو
Materials Studio (Computer software)
اوربیتالهای مولکولی -- داده‌پردازی
Molecular orbitals -- Data processing
دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری
Molecular dynamics -- Computer simulation
جلالی سروسناتی، محمدرضا، ۱۳۷۲ -
دانشگاه آزاد اسلامی، واحد یادگار امام خمینی (ره)
۵۴۱/۲۸۰۲۸۵/۲۶۲
۷۴۱۳۳۲۶

نگرشی بر گوسین ۰۹ و متریال استودیو

نویسنده: دکتر رویا احمدی، دکتر محمدرضا جلالی سروسناتی

ویراستار: علیرضا کریمیان

صفحه‌آرا: سارا کریمیان

طراح جلد: سحر کریمیان

چاپ اول: ۱۳۹۹

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

ناشر: دانشگاه آزاد اسلامی اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهری

لیتوگرافی، چاپ و صحافی: چاپخانه دانشگاه آزاد اسلامی

شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۱۰-۶۳۰۷-۰

قیمت: ۷۵۰۰۰ ریال



تهران، خیابان حافظ، روبه‌روی تالار بورس،
ساختمان فرهیختگان، طبقه سوم شرقی
تلفن: ۶۶۳۲۸۰۲۱

همه حقوق این اثر برای
نشر علمی و دانشگاهی دانشگاه آزاد اسلامی
محفوظ است.

سخن ناشر

دیرگاهی است که ایرانیان، به‌درستی و روا، به پیشینه علمی، فرهنگی و تمدنی خویش می‌بالند؛ سابقه‌ای درخشان که در میان مردمان جهان کمتر مشابه و همتایی دارد. تاریخ پرفرازونشیب ایران روایتگر روزگاری است که تندباد مصائب بی‌وقفه بر پیکر خاک مقدس این کهن‌بوم تازیانه می‌زد، اما دلیرمردان و شیرزنان این خاک از پایمردی و پایداری در مسیر تحقق آرمان‌های تمدنی و فرهنگی اسلام و ایران دست نکشیدند و با نیروی فکر و اندیشه در راه تکامل و ترقی ایران اسلامی گام برداشتند. گاه شداید روزگار از پایشان می‌انداخت، اما دگر بار یا خود به همت و ثبات رأی برمی‌خاستند یا بیرق فرهنگ و تمدن اسلام و ایران را به تالی خویش می‌سپردند.

تلاش‌ها و جان‌فشانی‌ها سرانجام در تحقق آرمان بلند ایرانیان، یعنی استقلال و آزادی، در برقراری نظام مقدس جمهوری اسلامی ایران به‌بار نشست و آغازی شد بر راهی که ایرانیان به پیشوایی ائمه معصوم^(علیهم‌السلام) و هدایت عالمانه بنیان‌گذار نظام مقدس جمهوری اسلامی، حضرت امام خمینی^(ره)، و رهبر معظم انقلاب اسلامی، حضرت آیت‌الله خامنه‌ای^(دامت‌طله)، در احیای تمدن بزرگ اسلامی ایران در پیش گرفتند.

از همان آغازین سال‌های برقراری نظام جمهوری اسلامی در ایران، تدبیر و تلاش به‌منظور تحقق بخشی از اهداف علمی و فرهنگی انقلاب برعهده دانشگاه نوپای آزاد اسلامی قرار گرفت و اکنون پس از گذشت بیش از چهار دهه، جامعه علمی کشور هم‌چنان از برکات خدمات این دانشگاه، به عنوان بزرگترین دانشگاه حضوری جهان، بهره‌مند است.

بخشی از خدمات علمی دانشگاه آزاد اسلامی در حوزه نشر علمی و دانشگاهی بوده است و به جرت می‌توان گفت سابقه ثبت‌شده دانشگاه آزاد اسلامی در نشر علمی و دانشگاهی، در منظر جهانی هم، کم‌نظیر و حیرت‌آور است. چاپ و نشر کتاب در دانشگاه آزاد اسلامی از همان بدو تأسیس این دانشگاه با مشارکت فعال و پویای واحدهای دانشگاهی و با هدف پاسخگویی به نیاز علمی استادان و دانشجویان دانشگاه آغاز شد و در سال ۱۳۶۸، چاپخانه‌ای نیز به منظور چاپ آثار گسترده دانشگاه افتتاح گردید.

هم‌اکنون، نشر علمی و دانشگاهی دانشگاه آزاد اسلامی با چاپ و انتشار بیش از ۱۰ هزار عنوان کتاب علمی و دانشگاهی و تنوع موضوعی بسیار گسترده و بی‌نظیر و دارا بودن بیش از ۵۰ ناشر فعال دارای پروانه نشر از وزارت فرهنگ و ارشاد اسلامی یکی از بزرگ‌ترین و فعال‌ترین ناشران دانشگاهی کشور است و انتشار بیش از ۵۰۰ عنوان کتاب جدید در سال گواه این مطلب است.

امید است آنچه به قلم توانمند دانشمندان و اندیشه‌ورزان دانشگاه آزاد اسلامی فراهم آمده و به کوشش نشر علمی و دانشگاهی این دانشگاه به پیشگاه و منظر فخیم و فرهیخته ایرانیان تقدیم می‌شود گامی مؤثر باشد در توسعه علمی، فناوریانه و فرهنگی کشور، و سببی باشد برای تقویت هویت ملی، اعتماد به نفس علمی، و اهمیت بیشتر برای ادامه راه پیشینیان در پیشرفت دانش و فرهنگ، و احیای تمدن بزرگ شایسته ایرانیان، و نیز آشنایی مردمان دیگر نقاط جهان با ذخایر عظیم دانش که در ایران اسلامی تولید و عرضه می‌گردد.

مجموعه نشر علمی و دانشگاهی دانشگاه آزاد اسلامی صمیمانه چشم دارد که این کار سترگ مورد پذیرش جامعه علمی ایران و جهان قرار گیرد و خوانندگان خادمان خود در این مجموعه را از نقد عالمانه و نیز دعای خیر بی‌نصیب نگذارند.

فهرست مطالب

پیشگفتار.....	۱۷
فصل اول: مروری بر شیمی محاسباتی.....	۱۹
۱-۱- مقدمه.....	۱۹
۲-۱- معادله شرودینگر.....	۲۱
۱-۲-۱- معادله شرودینگر معادله‌ای برای تابع موجی یک ذره.....	۲۱
۳-۱- محاسبات شیمیایی.....	۲۳
۱-۳-۱- روش‌های محاسبات آغازین (Ab-initio).....	۲۳
۲-۳-۱- روش‌های محاسباتی در شیمی نظری.....	۲۴
۳-۳-۱- روش‌های مکانیک مولکولی.....	۲۵
۴-۳-۱- روش محاسبات مکانیک کوانتومی.....	۲۷
۵-۳-۱- تقریب بورن- اپنهايمر.....	۲۸
۴-۱- تئوری هارتری- فاک.....	۲۹
۵-۱- توابع موج هارتری.....	۳۱
۱-۵-۱- توابع موج محدود شده و محدود نشده.....	۳۱
۲-۵-۱- توابع موج میدان خودسازگار (SCF) هارتری فاک.....	۳۲
۶-۱- نظریه تابعی چگالی (DFT).....	۳۴
۱-۶-۱- مروری مختصر بر نظریه تابعیت چگالی (DFT).....	۳۶
۷-۱- قضیه کوهن- هوهرنبرگ.....	۴۰

۴۴.....	۸-۱- سری های پایه روش های آغازین
۴۴.....	۱-۸-۱- سری های پایه پابل
۴۴.....	۲-۸-۱- سری پایه 3-21G
۴۵.....	۳-۸-۱- سری پایه 6-311G
۴۵.....	۴-۸-۱- سری پایه 4-31G
۴۶.....	۵-۸-۱- سری پایه 6-31G
۴۶.....	۶-۸-۱- سری اساسی 6-31G*
۴۶.....	۷-۸-۱- سری پایه 6-31G**
۴۷.....	۹-۱- نرم افزارهای مورد استفاده در محاسبات کوانتومی
۴۹.....	فصل دوم: معرفی گوسین ۰۹
۵۰.....	۱-۲- منو فایل (THE FILE MENU)
۵۰.....	۲-۲- منو فرآیند (THE PROCESS MENU)
۵۱.....	۳-۲- منو ابزارها (THE UTILITIES MENU)
۵۳.....	۴-۲- منو View
۵۳.....	۵-۲- منوی راهنما (THE HELP MENU)
۵۴.....	۶-۲- آیکون ها
۵۵.....	۷-۲- تکنیک کشیدن و رها کردن برای شروع فرآیند پردازش (DRAG AND DROP FILE EXECUTION)
۵۶.....	۸-۲- پنجره ویرایش فرآیند (THE JOB EDIT WINDOW)
۵۶.....	۱-۸-۲- منوی فایل (The File Menu)
۵۸.....	۲-۸-۲- منو ویرایش (The Edit Menu)
۵۸.....	۳-۸-۲- گزینه چک کردن مسیر (The Check-Route Option)
۵۸.....	۴-۸-۲- گزینه شروع مجموعه (The Set Start Option)
۵۹.....	۵-۸-۲- آیکون ها
۶۰.....	۹-۲- دکمه مراحل اضافی (THE ADDITIONAL STEPS BUTTON)
۶۰.....	۱۰-۲- پنجره مراحل اضافی عملیات (THE ADDITIONAL JOB STEPS WINDOW)
۶۰.....	۱-۱۰-۲- ظاهر اولیه پنجره
۶۱.....	۲-۱۰-۲- منوی مرحله (The Step Menu)
۶۲.....	۳-۱۰-۲- منوی ویرایش (The Edit Menu)

۶۲	 (The view Menu) منوی چشم انداز ۴-۱۰-۲
۶۳	 (The Check Route Item) گزینه چک کردن مسیر ۵-۱۰-۲
۶۳	 آیکون ها ۶-۱۰-۲
۶۳	 (The EDIT BATCH LIST) BATCH ویرایش فهرست ۱۱-۲
۶۴	 (BATCH CONTROL FILE FORMAT) BATCH قالب فایل کنترل ۱۲-۲
۶۵	 BATCH ویرایش یک فایل کنترل ۱۳-۲
۶۵	 (The File Menu) منوی فایل ۱-۱۳-۲
۶۶	 (Control Buttons) دکمه های کنترل ۲-۱۳-۲
۶۶	 BAT محل فایل خروجی پردازش ۱۴-۲
۶۷	 (THE RE-ORDERING DATA WINDOW) پنجره بازآرایی چینش داده ها ۱۵-۲
۶۷	 حرکت دادن یک گزینه ۱-۱۵-۲
۶۸	 حرکت دادن چند گزینه با دکمه Group ۲-۱۵-۲
۶۸	 دکمه های خروج ۳-۱۵-۲
۶۸	 (THE CHECK ROUTE FACILITY) امکان چک کردن مسیر ۱۶-۲
۶۹	 (THE GAUSSIAN09W PREFERENCE WINDOW) پنجره ترجیحات گوسین ۰۹ ۱۷-۲
۷۱	 DISPLAY PREFERENC پنجره ۱۸-۲
۷۲	 (The Colors Area) بخش رنگ ها ۱-۱۸-۲
۷۲	 (The Font Buttons) دکمه های فونت ۲-۱۸-۲
۷۳	 (THE EDIT PREFERENCE WINDOW) پنجره ویرایش اولویت ها ۱۹-۲
۷۳	 (The File Overwrite Warnings) بخش هشدارهای دوباره نوشته شدن فایل ۱-۱۹-۲
۷۳	 (The Multi-Step Job File Saves Area) بخش ذخیره کردن فایل فرآیندهای چندگانه ۲-۱۹-۲
۷۴	 (THE PROCESS PREFERENCES WINDOW) پنجره پردازش اولویت ها ۲۰-۲
۷۴	 (The File Load and Process Area) بخش بارگذاری فایل و پردازش ۱-۲۰-۲
۷۵	 (The Batch Processing Area) Batch قسمت پردازش ۲-۲۰-۲
۷۵	 (Drag and Drop Area) بخش کشیدن و رها کردن ۳-۲۰-۲
۷۵	 ورود سریع به پنجره اولویت ها ۲۱-۲
۷۶	 ابزارهای گوسین ۰۹ ۲۲-۲
۷۶	 NewZMa امکان ۱-۲۲-۲
۷۷	 (The Conversion Process Area) بخش پردازش تبدیل ۱-۱-۲۲-۲

۷۸.....	۲-۱-۲۲-۲ دگمه های آپشن
۷۹.....	۳-۱-۲۲-۲ پنجره سایر گزینه های NewZMat (The NewZMat Other Options Window)
۸۰.....	۴-۱-۲۲-۲ بخش تقارن (The symmetry Area)
۸۰.....	۵-۱-۲۲-۲ قسمت اتصال (Connectivity Area)
۸۱.....	۶-۱-۲۲-۲ بخش چگالی کش (CaChe Density Area)
۸۱.....	۷-۱-۲۲-۲ سایر گزینه ها
۸۱.....	۲-۲۲-۲ ابزار CubeGen
۸۲.....	۳-۲۲-۲ ابزار Cubeman
۸۵.....	۴-۲۲-۲ ابزار FreqChk
۸۶.....	۵-۲۲-۲ ابزار FormChk
۸۶.....	۶-۲۲-۲ ابزار UnFchk
۸۶.....	۷-۲۲-۲ ابزار ChkChk
۸۷.....	۸-۲۲-۲ ابزار C8609
۸۷.....	۲۳-۲ فایل پیکر بندی DEFAULT.ROU
۸۹.....	فصل سوم: گوسین و محاسبات قابل اجرا در آن
۸۹.....	۱-۳-۱ آشنایی با برنامه GAUSSIAN
۹۲.....	۲-۳-۱ انواع محاسبات قابل انجام در برنامه GAUSSIAN
۹۲.....	۱-۲-۳ محاسبات تک نقطه ای انرژی
۹۲.....	۲-۲-۳ محاسبات بهینه سازی ساختار
۹۳.....	۳-۲-۳ محاسبات NMR
۹۳.....	۱-۳-۲-۳ موارد استفاده NMR
۹۴.....	۴-۲-۳ محاسبات NBO
۹۴.....	۳-۳ محاسبات فرکانس
۹۵.....	۴-۳ دستور NBO
۹۵.....	۵-۳ نحوه دستور در صورت وجود اتم سنگین مثل تلور Te در یک مولکول
۹۵.....	۶-۳ دستور NMR
۹۶.....	۷-۳ روش های محاسبات کامپیوتری
۹۶.....	۸-۳ دوروش محاسبه GIAO و IGLO

۹۷	۹-۳- رسم مولکول در نرم افزار گوس ویو
۹۷	۱-۹-۳- طرز رسم ملکول
۱۰۹	۲-۹-۳- رسم مولکول در برنامه Chem Office
۱۱۱	۱۰-۳- روش اجرای محاسبه در نرم افزار گوسین GAUSSIAN
۱۱۷	۱۱-۳- نحوه استخراج اطلاعات از محاسبات گوسین
۱۲۰	۱-۱۱-۳- استخراج اطلاعات از شکل ساختار بهینه شده توسط محاسبات
۱۲۰	۱۲-۳- کاربرد برخی از نمادهای برنامه گوس ویو
۱۲۱	۱۳-۳- مشخص کردن نوع و شماره اتم ها بر روی کمپلکس
۱۲۱	۱۴-۳- تبدیل خروجی با سطح پائین محاسبه به فایل ورودی با سطح بالا محاسبه (CHK → GJF)
۱۲۲	۱۵-۳- اشاره به برخی از دستورات غلط ERROR
۱۲۵	فصل چهارم: نگاهی اجمالی بر نرم افزار MATERIALS STUDIO
۱۲۵	۱-۴- نحوه ایجاد یک پروژه جدید
۱۲۸	۲-۴- نحوه رسم مولکول در برنامه MATERIALS STUDIO
۱۲۸	۱-۲-۴- رسم مولکول های ساده
۱۳۱	۲-۲-۴- رسم مولکول های آلی و لیگاندها
۱۳۶	۳-۲-۴- ساختن پلیمرها
۱۳۶	۱-۳-۲-۴- ساختن هوموپلیمر
۱۳۸	۲-۳-۲-۴- ساختن بلوک پلیمر
۱۳۹	۳-۳-۲-۴- ساختن پلیمرهای رندوم
۱۳۹	۴-۳-۲-۴- ساختن دندریمرها
۱۴۱	۴-۲-۴- رسم نانوساختارها
۱۴۵	۵-۲-۴- رسم ساختارهای مزو
۱۴۶	۶-۲-۴- رسم ساختارهای کریستالی
۱۵۰	۳-۴- اجرای محاسبه در برنامه متریال استودیو
۱۶۷	فصل پنجم: نمونه هایی از مقالات کار محاسباتی
۱۶۷	۱-۵- بررسی ترمودینامیکی برهمکنش تریل با نانو ساختار فولرن (C24)
۱۶۷	۱-۱-۵- چکیده
۱۶۸	۲-۱-۵- مقدمه

۱۷۰	۵-۱-۳- روش های محاسباتی
۱۷۲	۵-۱-۴- بحث و نتایج
۱۷۲	۵-۱-۴-۱- بررسی انرژی جذب شیمیایی و خواص ساختاری
۱۷۷	۵-۱-۵- محاسبه و بررسی پارامترهای ترمودینامیکی فرآیند جذب شیمیایی تریل
۱۸۱	۵-۱-۶- محاسبه و بررسی ظرفیت گرمایی ویژه (Cv)
۱۸۲	۵-۱-۷- تجزیه و تحلیل نتایج محاسبات اوربیتال های مولکولی
۱۸۶	۵-۱-۸- نتیجه گیری
۱۸۷	۵-۱-۹- مراجع
	۵-۲- بررسی جذب سطحی داروی لوودوپا بر روی سطح گرافن و نانو مخروط کربنی با استفاده از تئوری
۱۹۱	تابعی چگالی
۱۹۱	۵-۲-۱- چکیده
۱۹۱	۵-۲-۲- مقدمه
۱۹۴	۵-۲-۳- روش های محاسباتی
۱۹۷	۵-۲-۴- نتایج و بحث
۱۹۷	۵-۲-۴-۱- بررسی انرژی جذب سطحی
۱۹۹	۵-۲-۵- محاسبه و بررسی پارامترهای ترمودینامیکی فرآیند جذب سطحی لوودوپا
۲۰۶	۵-۲-۶- آنالیز نتایج محاسبات اوربیتال های مولکولی
۲۰۹	۵-۲-۷- نتیجه گیری
۲۰۹	۵-۲-۸- مراجع
	۵-۳- بررسی عملکرد یک فنوتیازین تازه سنتز شده به عنوان یونوفور در ساخت یک الکتروود یون گزین با
۲۱۱	استفاده از تئوری تابعی چگالی
۲۱۱	۵-۳-۱- چکیده
۲۱۲	۵-۳-۲- مقدمه
۲۱۴	۵-۳-۳- روش های محاسباتی
	در این تحقیق، تمامی محاسبات مرتبط به لیگاند، کاتیون های فلزی و کمپلکس های حاصل از
۲۱۴	برهمکنش
۲۱۴	۵-۳-۴- بحث و نتایج
۲۱۴	۵-۳-۴-۱- بررسی ساختار کمپلکس
۲۱۶	۵-۳-۵- محاسبه و بررسی مقادیر تغییرات آنتالپی تشکیل کمپلکس

پیشگفتار

امروزه علم شیمی با سرعت بسیار زیاد و در جهات مختلف در حال پیشرفت و گسترش است. و در مقایسه با دیگر علوم پایه، نقش مهمی در گسترش علم دارد، و با بهره‌گیری از دیگر علوم و پیشرفت‌های دستگاهی و کامپیوتری در پنجاه سال اخیر رشد فوق العاده چشم‌گیری به خصوص 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 صنعت یک کشور نقش کلیدی و زیر بنایی دارد. خوشبختانه علم شیمی در کشور ما به واسطه اساتید برجسته، پژوهشگران و دانشجویان ممتاز در سال‌های اخیر، پیشرفت چشمگیری داشته است. شیمی به واسطه پیشرفت علوم کامپیوتری و نرم‌افزارهای شیمی کوانتومی در دو دهه اخیر در زمینه شیمی محاسباتی پیشرفت قابل ملاحظه‌ای داشته است. پس می‌توان یک شاخه جدید به علم شیمی تحت این عنوان اضافه نمود و استفاده از نرم‌افزارهای محاسباتی که روز به روز، به تعدادشان افزوده و البته کاربردهای آن‌ها نیز آسان‌تر می‌شود، به عنوان مثال خواص کوانتومی مواد و پیشگویی انجام واکنش‌ها و بسیاری از خواص فیزیکی و شیمیایی مواد را می‌توان محاسبه و با یکدیگر مقایسه نمود. از این رو استفاده از این نرم‌افزارها به دلیل جدید بودن و کاربرد ساده آنها در رشته‌های شیمی الی، شیمی معدنی، شیمی فیزیک، بیوشیمی، بیوفیزیک، علوم دارویی، فیزیک و نانو و... کاربرد روز افزونی یافته است. بررسی دقیق ساختارهای حالت گذار در سازوکار واکنش‌ها و نوآوری‌ها و بررسی ساختارهای حالت برانگیخته، به دست آوردن شکل و انرژی اوربیتال‌های مولکولی، هیبریداسیون و باز اتمی

دقیق اتم‌ها، اندازه‌گیریهای کمی و مقایسه آروماتیسیتیه برای انواع حلقه‌های آروماتیک در مولکول‌های آلی، معدنی، بیولوژیکی، دارویی، نانو مواد و حتی در ساختارهای حالت گذار بسیاری از مواد دیگر تنها قسمتی از کاربرد منحصر به فرد شیمی محاسباتی است. دانش پایه‌ای شیمی، کامپیوتر خانگی با قدرت مناسب و نرم‌افزارهای مربوطه، عوامل مهمی برای پژوهش در زمینه شیمی محاسباتی است. این نوع پژوهش می‌تواند در کنار آزمایش‌های تجربی و به عنوان کامل کننده تحقیقات یک محقق باشد یا به صورت مستقل و کاملاً تئوری انجام شود. به همین علت محققان بسیاری 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 بر آن است که ضمن توضیح ساده و مختصر مطالب با ارائه نمونه کارهای محاسباتی، رویکرد کاربردی و پژوهشی داشته باشد. این کتاب ابتدا مروری بر شیمی محاسباتی دارد، سپس معرفی گوسین ۰۹، و محاسبات قابل اجرا در آن بررسی می‌شود بعد از آن نگاهی اجمالی بر نرم‌افزار Materials Studio با قدرت زیاد در انجام محاسبات مکانیک مولکولی شده است، و در آخر نمونه‌هایی از مقالات کارهای محاسباتی گنجانده شده است که برخی از کاربردهای پژوهشی مطالب داخل فصول را نشان می‌دهد. که مربوط به نگارندگان کتاب است. امید است این کتاب برای علاقمندان و دانشجویان مفید واقع شود.