

به نام خدا

آموزش کاربردی نرم افزارهای

Guassian ChemOffice GaussView Hyperchem AIM

شامل:

روش ساده برای طراحی مولکول های پیچیده
محاسبات NBO, BSSE, TS, freq, opt و ...
محاسبات توصیف گرهای QSPR و QSAR
تئوری پیوندها و تشخیص نوع پیوند با توجه به
محاسبات (تحلیل داده)
و ...

نوشته ی:

صادق علی باوفا

فهمیه باوفا



۱۳۸۹

سرشناسه: باوفا، صادقعلی، ۱۳۶۲-

عنوان و نام پدیدآور:

آموزش کاربردی نرم افزارهای **Guassian, ChemOffice, GaussView, Hyperchem & AIM**

روش های ساده برای طراحی مولکولهای پیچیده ... نوشته ی صادقعلی باوفا، فهیمه باوفا :

مشخصات نشر: تهران: اندیشه سرا، ۱۳۸۸.

مشخصات ظاهری: ۱۲۸ ص:، مصور، جدول، نمودار

شابک 978-600-5716-01-6

وضعیت فهرست نویسی: شیپا

یادداشت: کتابنامه: ص، ۱۲۸.

موضوع: نرم افزار گاوسی

موضوع: مولکول ها -- الگوها -- نرم افزار

موضوع: ساختار مولکولی -- نرم افزار

موضوع: اوربیتالهای مولکولی -- داده پردازی

شناسه افزوده: باوفا، فهیمه، ۱۳۶۵-

رده بندی کنگره: ۱۳۸۸ ۸ ۲/ب / QD ۴۸۰

رده بندی دیویی: ۵۴۱/۲۲

شماره کتابشناسی ملی: ۱۸۹۲۴۱۸



انتشارات اندیشه سرا

آموزش کاربردی نرم افزارهای

Guassian, ChemOffice, GaussView, Hyperchem & AIM

نوشته ی: صادقعلی باوفا - فهیمه باوفا

چاپ اول ۱۳۸۹ شمارگان: ۱۰۰۰ بها: ۳۵۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۵۷۱۶-۰۱-۶ ISBN 978-600-5716-01-6

حق چاپ و نشر محفوظ و هرگونه استفاده از محتوای کتاب به هر شکل و نحو به اجازه ی کتبی از ناشر نیازمند است.

اندیشه سرا از انتشار کتاب های ارزشمند حمایت می کند.

۸۸۰۰۶۴۸۷ - ۰۹۱۲۳۱۶۱۶۸۷

www.andishehsara.org

ستایش بیکران ایزد مهربان را که به کائنات هستی بخشید و قدرت تفکر به آدمی عطا کرد. زندگی ما زمانی نام حقیقی برخورد می گیرد که بر سه بستر علم، هنر و مردم باشد که باقی همه خسران و ضرر است و نام زندگی را بر آن نتوان نهاد.

پیشرفت های نرم افزارهای، برنامه های طراحی و محاسباتی کوانتومی در حقیقت نمایانگر تلاش گروهی از دانشمندان، محققان و برنامه نویسان می باشد که در اختیار علاقمندان به این علم قرار گرفته است، که دانشجویان با یادگیری و استفاده ی این دسته از نرم افزارها و ترکیب آن ها با توانمندی ها و تخصص های فردی خود، پیشرفت و از مزایای این نرم افزارها بهره می برند.

در این کتاب به آموزش معتبرترین نرم افزارهای طراحی و محاسباتی کوانتومی از قبیل گوسین (Gaussian 98W and Gaussian 03W)، GaussView، ChemOffice، AIM، HyperChem پرداخته ایم. علاوه بر آموزش به تئوری پیوندها به خصوص پیوند هیدروژنی، NBO، AIM و در حد امکان به توصیف گرهای مورد نیاز در زمینه ی QSAR و QSPR نیز پرداخته شده است.

از اساتید محترم و دانشجویان عزیز تقاضا دارم هر گونه نقصانی در مورد مطالب کتاب مشاهده کرده اند به ایمیل اینجانب که در آخر صفحه وجود دارد ارسال کنند تا با راهنمایی شما عزیزان بتوانیم برای دوره های بعد کتابی جامع تر تهیه نماییم.

در آخر جای دارد از اساتید محترم، پدر زحمتکش و برادر گرامی که پیشرفت در هر زمینه بابت تشویق های ایشان، مادر مهربان و خواهر عزیزم که در ترجمه ی متون مرا یاری نمود و آنانی که دوستانشان دارم بی نهایت تشکر کنم، با آن که زبان قلم را یاری ادای احترام، به این همه لطف نیست.

"فضائی بین پندار و عمل وجود دارد که با پشتکار پیموده می شود". جبران خلیل جبران

صادقعلی باوفا

s.ali.bavafa@Gmail.com

فصل اول: نرم افزار کم آفیس (ChemOffice)

۷	۱-۱ معرفی نرم افزار کم آفیس (ChemOffice)
۷	۱-۱-۱ معرفی کلیدهای کاربردی (ChemOffice)
۸	۲-۱ رسم ساختار سادهی مولکول در (Chem3D Ultra)
۹	۳-۱ محاسبات MOPAC با ChemOffice
۱۱	۴-۱ طراحی ساختار پیچیده توسط نرم افزار ChemDraw
۱۴	۵-۱ رسم NMR
۱۵	۶-۱ محاسبات Chem3D (ویژهی محاسبات QSAR و QSPR)
۱۶	۷-۱ قرار دادن دو مولکول در کنار هم
۱۹	۸-۱ ساختن فایل ورودی گوسین
۲۴	۹-۱ اجرا (RUN) گوسین

فصل دوم: روشی (Gaussian) و محاسبات گوسین

۲۷	۱-۲ GaussView
۲۹	۲-۲ تبدیل فایل خروجی گوسین به فایل ورودی گوسین
۳۰	۳-۲ انواع فایل های ورودی
۳۰	۴-۲ دستورات گوسین
۳۰	۱-۳-۲ opt یا opt
۳۱	۲-۳-۲ Freq
۳۲	۳-۳-۲ روش های تشخیص صحیح بودن جواب های دستور Freq
۳۶	۴-۳-۲ خروجی محاسبات فرکانسی
۳۸	۴-۴ توصیف گرهای موجود در دستور freq
۳۸	۱-۴-۲ انرژی ها
۳۹	۲-۴-۲ آنتالپی و انرژی های واکنش
۴۱	۳-۴-۲ جرم مولکولی (Molecular Mass)
۴۱	۴-۴-۲ قطبش پذیری (Polarizability)
۴۲	۵-۴-۲ به دست آوردن حالت گذار (TS)
۴۹	۶-۴-۲ راه های تشخیص صحیح بودن حالت گذار (TS)
۵۱	۵-۲ potential=prop
۵۲	۶-۲ محاسبه ی سرعت واکنش
۵۳	۷-۲ دستور NBO
۵۴	۱-۷-۲ توصیف گر ها
۵۴	۲-۷-۲ دیاگرام لونیس
۵۵	۳-۷-۲ E(2)
۵۵	۸-۲ volume (حجم مولکولی)
۵۶	۹-۲ دستور NMR
۵۷	۱۰-۲ مشاهده ی اندازه و زوایای مولکول
۵۸	۱۱-۲ روش های مجموعه بایده ی کامل (Complete Basis Set Methods(CBS))
۵۹	۱-۱۱-۲ انرژی یونیزاسیون (Ionization Potentials)
۶۱	۲-۱۱-۲ انرژی کشش الکترون (Electron affinity)
۶۲	۳-۱۱-۲ انرژی کشش پروتون (Proton affinity)

۶۲	۴-۱۱-۲ انرژی اتمیزاسیون (Atomization)
۶۳	۴-۱۲-۱ scan
۶۳	۴-۱۲-۱-۱ Scan (فاصله)
۶۶	۴-۱۲-۲ Scan یک زاویه‌ی دو وجهی (Dihedral angle)
۶۹	۴-۱۳ اوربیتال‌های HOMO و LUMO
۷۲	فصل سوم: نرم افزار AIM
۷۲	۳-۱ فایل ورودی AIM
۷۴	۳-۲ روش محاسبه‌ی نقاط بحرانی
۷۹	۳-۲-۱ ذخیره کردن نتایج محاسبات
۷۹	۳-۲-۲ توصیفگرها
۸۲	۳-۲-۳ محاسبه‌ی اتم‌ها
۸۵	۳-۳ رسم کانتور
۸۷	فصل چهارم: خطاهای کوپین
۸۷	۴-۱ خطای تعداد سیکل
۸۸	۴-۲ خطای مربوط به رفتن برق
۸۸	۴-۳ خطای مسیر
۸۹	۴-۴ خطای انطباق مجموعه پایه BSSE
	فصل پنجم: انرژی‌های پیوندی
۹۳	۵-۱ معرفی هاپرکم
۹۳	۵-۲ طریقه‌ی رسم مولکول
۹۷	۵-۳ ساخت فایل ورودی کوپین (bz)
	فصل ششم: انرژی‌های کوپین
۱۰۱	۶-۱ پیوند کووالانسی
۱۰۴	۶-۲ پیوند دانیو
۱۰۴	۶-۳ پیوند هیدروژنی (نوع خاصی از پیوندهای دو قطبی-دوقطبی)
۱۰۶	۶-۳-۱ فواصل و زوایا
۱۰۷	۶-۳-۲ طبقه بندی پیوندهای هیدروژنی
۱۰۸	۶-۳-۳ تفاوت پیوند هیدروژن-هیدروژن و پیوند دو هیدروژنی
۱۰۹	۶-۴ پیوند یونی (الکترووالانسی)
۱۱۱	۶-۵ نظریه‌ی اتم‌ها در مولکول‌ها (AIM)
۱۱۱	۶-۵-۱ فرضیه‌ی اتم
۱۱۲	۶-۵-۲ تعریف هندسه‌ی فضایی اتم
۱۱۴	۶-۵-۳ تعریف اتم در نظریه‌ی اتم در مولکول
۱۱۶	۶-۵-۴ تعریف پیوند
۱۲۲	۶-۵-۵ تشخیص نوع پیوند با توجه به توصیفگرهای AIM
۱۲۲	۶-۶ تحلیل اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO)
۱۲۵	۶-۷ خطای انطباق مجموعه پایه (BSSE)

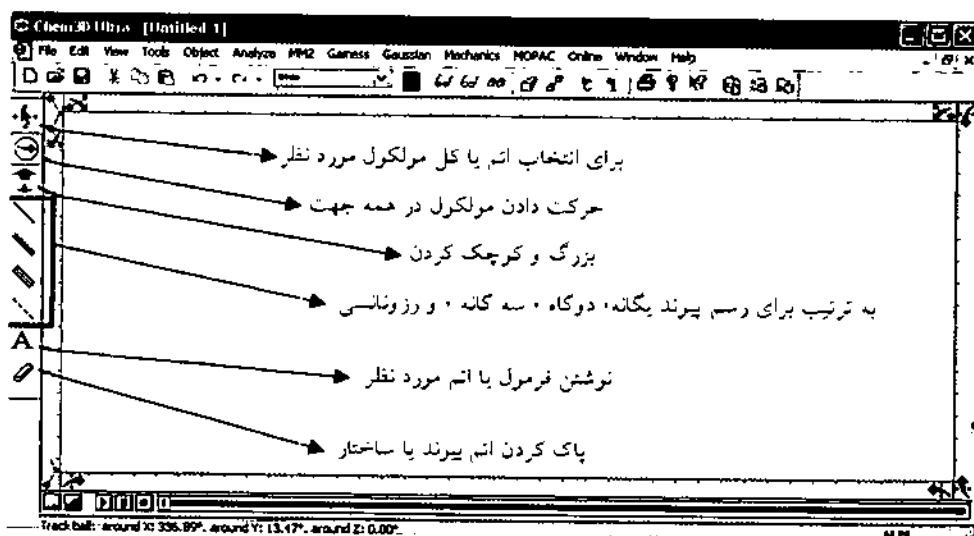
نرم افزار کم آفیس (ChemOffice)

۱-۱ معرفی نرم افزار کم آفیس (ChemOffice)

این بسته نرم افزاری از مجموعه‌ای چند نرم افزار طراحی و محاسباتی تشکیل شده است که به آموزش نرم افزارهای کاربردی آن می‌پردازیم. توانایی این نرم افزار در سادگی کار با آن می‌باشد.

۱-۱-۱ معرفی کلیدهای کاربردی (Chem3D Ultra):

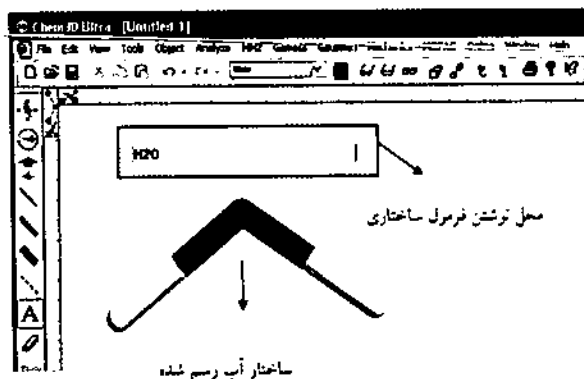
این نرم افزار برای طراحی سه بعدی ساختار مولکول‌ها می‌باشد، کلیدهای کاربردی آن را در شکل زیر معرفی کرده‌ایم. (شکل ۱)



شکل ۱

۱-۲ رسم ساختار سادهی مولکول در (Chem3D Ultra):

برای رسم در این نرم افزار راه های مختلفی برای سهولت کار وجود دارد. بر روی کلید A کلیک کرده، در قسمتی از میز کار کلیک کنید تا مستطیلی برای نوشتن فرمول ساختاری مولکول باز شود. اکنون تایپ کنید، H_2O و اینتر را فشار دهید، ساختار آب ایجاد می شود. (شکل ۲)

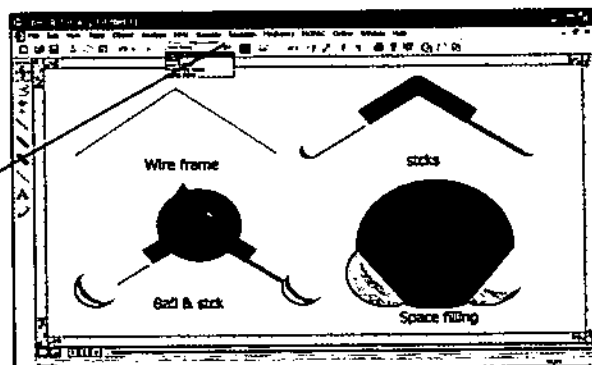


شکل ۲

برای مثال NH_3 و H_2O_2 را رسم کنید.

نکته: حروف بزرگ و کوچک باید طبق نام اتم رعایت شود.

برای مثال Br، که حرف B به صورت حروف بزرگ انگلیسی و r حروف کوچک و یا H_2O همه با حروف بزرگ نوشته می شود. ساختار مولکول ها را می توان به پنج صورت مشاهده کرد. (شکل ۳)



شکل ۳

با کلیک روی
مثلث کوچک
می توانید انواع
نمایش ساختار
را مشاهده کنید.