

سری درس‌های علوم و تحقیقات (۴)

مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی
طراحی و شبیه‌سازی با استفاده از روش‌های
مکانیک مولکولی - دینامیک مولکولی

تألیف و ترجمه:

مجید منجمی

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات

فرشته نادری

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شهریار - شهر قدس

فاطمه ملازمین

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی

واحد قم

سرشناسه

: منجمی، مجید، ۱۳۳۶.

عنوان و نام پدیدآور : طراحی و شبیه سازی با استفاده از روشهای مکانیک مولکولی -

دینامیک مولکولی / مولفان مجید منجمی، فاطمه ملا امین، فرشته نادری.

مشخصات نشر

: تهران: قلم فرزاتگان، ۱۳۸۷.

مشخصات ظاهری

: ۳۷۷ ص:، مصور، نمودار.

فروست

: سری درسهای علوم و تحقیقات: ۴.

شابک

: ۶۰۰۰۰ ریال: 978-964-7050-51-7

وضعیت فهرست نویسی: فیپا

یادداشت

: بالایی عنوان: مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی.

یادداشت

: کتابنامه: ص [۳۷۳]-۳۷۷. همچنین به صورت زیرنویس.

عنوان دیگر

: مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی

موضوع

: شیمی فیزیک - شبیه سازی کامپیوتری.

موضوع

: دینامیک مولکولی - شبیه سازی کامپیوتری.

موضوع

: ساختار مولکولی - شبیه سازی کامپیوتری.

شناسه افزوده

: ملا امین، فاطمه، ۱۳۵۲.

شناسه افزوده

: نادری، فرشته، ۱۳۵۲.

رده بندی کنگره

: ۱۳۸۷ م ۸۳ ش ۴۵۵/۳ QD

رده بندی دیویی

: ۵۴۱/۰۱۱۳

شماره کتابشناسی ملی

: ۱۲۳۰۴۶۰

نام کتاب : طراحی و شبیه سازی با استفاده از روشهای مکانیک مولکولی - دینامیک مولکولی.

تالیف و ترجمه : مجید منجمی، فاطمه ملا امین، فرشته نادری.

چاپ اول : تابستان ۱۳۸۷

چاپ : دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات

شابک : ISBN 978 964 7050 51-7

قیمت : ۶۰۰۰۰ ریال

تیراژ : ۱۰۰۰

"پیام خدا"

کتاب ارزنده Hyperchem بعنوان کتاب روشهای محاسباتی برای سیستم های بیولوژیکی
از قبیل protein folding و پروتئینی غشایی Transmembrane (انتگرال
و محیطی (Peripheral) بسیار مفید فایده می باشد.

در سالهای اخیر روشهای مکانیک مولکولی، مکانیک کوانتومی و سیمپلایز برای کامپیوتری با
روند پرشتاب است. خود را نشان داده و جایگاه ویژه خود را در علوم تجربی یافته اند.
Hyperchem کمترین اندازه گرافیکی، مولکولی و محاسباتی برای حجم کلی مولکولها و
تجزیه و تحلیل پلیمرهای از قبیل پروتئینها، اسیدهای نوکلئیک، لیپیدها در غشای می باشد.
این کتاب بعنوان گنجینه ای ارزنده برای دانشجویان و پژوهشگران زیست شناسی و بیوشیمی
برای اطلاع محققان کارشناسان است و دکتر احسانیت بوده و مطالعه آن توصیه
میشود.

آرزوی موفقیت دست اندرکاران تالیف این کتاب، آقا دکتر مجید نجفی همکاران
و سرکار خانم دکتر فاطمه ملائین و سرکار خانم دکتر غنچه نادری را از خداوند متعال خواستارم.

یا آرزوی موفقیت
بیشتر
شماره پانزدهم
پایان

پیشگفتار

بی‌گمان پنجاه سال پیش که نخستین کامپیوترها پا به عرصه علم و فن‌آوری گذاشتند، هیچ‌کس حتی تصور هم نمی‌کرد، روزی فرا برسد که علوم تجربی همچون شیمی، فیزیک و حتی زیست‌شناسی تا این حد وابسته به مباحث پیشرفته در زمینه روش‌های تئوری باشند. در این میان علم شیمی فیزیک، گوی سبقت را از سایر علوم ربوده است. نگاه گذرا به هزاران مقاله علمی که سالانه در سراسر جهان منتشر می‌شود، مؤید این ادعاست.

اما نکته حائز اهمیت که می‌بایستی تمامی محققان به آن بیش از پیش بپردازند، نگرش به علوم بین رشته‌ای و تلفیقی است.

لذا بر آن شدیم تا جهت استفاده هرچه بیشتر محققان مطالبی را در زمینه مباحث نوین از عمق مقالات ISI و معتبر علمی استخراج کنیم تا راهگشای دانش پژوهانی گردد که مصمم به چاپ مقالات در زمینه کارهای تحقیقاتی خویش می‌باشند.

مجموعه مطالب گردآوری شده توسط گروه تحقیقاتی مادر قالب یک سری مباحث پیشرفته به تدریج تحت عناوین خاص چاپ می‌گردد.

سری (۱) این مجموعه تحت عنوان تانسورهای پوشیدگی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای، سری (۲) روش‌های محاسبات ترکیبی کوانتوم مکانیک - مولکولار مکانیک (QM/MM)، سری (۳) خشت‌های شیمی محاسباتی: «مروری بر مجموعه توابع پایه» منتشر گردید. هم‌اکنون سری (۴) یعنی کتاب حاضر تدوینی از تمامی روابط و مفاهیم روش‌های طراحی و شبیه‌سازی با استفاده از روش‌های مکانیک مولکولی - دینامیک مولکولی با استفاده از مباحث تئوری می‌باشد که از مقالات استخراج شده است. امید است این تلاش صادقانه مورد استقبال شما قشر دانشگاهی قرار گیرد و دعای خیر خود را بدرقه راهی که گشوده‌ایم، نماید.

انشاء...!

مؤلفان

فهرست مندرجات

بخش اول: راهنمای عملی.....	۲۷
فصل اول - مقدمه راهنمای عملی.....	۲۹
۱-۱ شیمی محاسباتی چیست؟.....	۲۹
۲-۱ HyperChem چیست؟.....	۳۰
۱-۲-۱ ساختن و نمایش مولکول‌ها.....	۳۰
۲-۲-۱ بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها.....	۳۰
۳-۲-۱ بررسی واکنش‌پذیری مولکول‌ها.....	۳۱
۴-۲-۱ تولید و نمایش اربیتال‌ها و نمودارهای الکترونی.....	۳۱
۵-۲-۱ ارزیابی مسیرها و مکانیسم‌های واکنش شیمیایی.....	۳۲
۶-۲-۱ مطالعه رفتار دینامیکی مولکول‌ها.....	۳۲
فصل دوم - محاسبات HyperChem.....	۳۳
۱-۲ سطوح انرژی پتانسیل.....	۳۳
۱-۲-۱ پیچیدگی سطوح انرژی پتانسیل.....	۳۶
۲-۲ انواع محاسبات.....	۳۸
۱-۲-۲ تک نقطه.....	۳۸
۲-۲-۲ بهینه‌سازی هندسی.....	۳۸
۳-۲-۲ بررسی حالت‌گذار.....	۳۹
۴-۲-۲ دینامیک مولکولی.....	۴۰
۵-۲-۲ دینامیک لانگوین.....	۴۰

۶-۲-۲ شبیه سازی های مونت کارلو ۴۱

فصل سوم - روش های محاسباتی ۴۳

۱-۳ مکانیک مولکولی ۴۳

۱-۱-۳ پیوندها و زوایا ۴۵

۲-۱-۳ پیچش ها (دو وجهی ها) ۴۶

۳-۱-۳ بر همکنش های واندروالسی و پیوند هیدروژنی ۴۷

۴-۱-۳ پتانسیل الکترواستاتیک ۴۹

۵-۱-۳ میدان های نیروی اتم متحد در مقابل همه اتم ها ۵۰

۶-۱-۳ برش ها ۵۰

۲-۳ مکانیک کوانتومی ۵۲

۱-۲-۳ پیش زمینه ۵۳

۱-۱-۲-۳ هندسه مولکولی ۵۳

۲-۱-۲-۳ محاسبه انرژی پتانسیل الکترونی ۵۴

۲-۲-۳ محدوده روش های مکانیک کوانتومی ۵۵

۳-۲-۳ اصل طرد ۵۶

۴-۲-۳ توابع موج ساده ۵۷

۵-۲-۳ تابع موج هارتری - فاک ۵۸

۶-۲-۳ توسعه محاسبه تابع موج ۵۹

۱-۶-۲-۳ برهمکنش پیکربندی ۵۹

۲-۶-۲-۳ تئوری اختلال مولر - پلست ۶۱

۷-۲-۳ اربیتال های مولکولی و ساختار الکترونی ۶۲

۱-۷-۲-۳ اشغال اربیتالی ۶۳

۲-۷-۲-۳ اربیتال های اتمی و برهمکنش های آن ها ۶۴

۳-۷-۲-۳ تکنیک SCF ۶۵

۲-۷-۲-۳ اربیتال های مجازی ۶۶

۸-۲-۳ RHF و UHF ۶۶

۱-۸-۲-۳ چندگانگی ۶۶

۶۷	۳-۲-۸ شکستن پیوند
۶۸	۳-۲-۹ تکنیک نیم-الکترونی RHF
۶۹	۳-۲-۱۰ همگرایی SCF
۷۰	۳-۲-۱۱ نتایج محاسبه
۷۱	۳-۲-۱۱-۱ نتایج کمی
۷۳	فصل چهارم - محاسبات تک نقطه
۷۴	۴-۱ ممان دو قطبی
۷۴	۴-۲ دانسیته الکترونی کل
۷۴	۴-۳ دانسیته اسپینی کل
۷۴	۴-۴ پتانسیل الکترواستاتیک
۷۵	۴-۵ مثال‌هایی از محاسبات تک نقطه
۷۹	فصل پنجم - بهینه‌سازی‌های هندسی و بررسی حالت‌گذار
۷۹	۵-۱ بهینه‌سازی هندسی
۸۰	۵-۱-۱ کاهش شیب تند
۸۱	۵-۱-۲ گرادیان مزدوج
۸۲	۵-۱-۳ قطری بلوکی
۸۲	۵-۱-۴ تابعیت ویژه‌بردار
۸۳	۵-۱-۵ تعیین معیارهای همگرایی
۸۳	۵-۱-۶ مثالهایی از بهینه‌سازی هندسی
۸۴	۵-۱-۷ حلال‌پوشی و شرایط مرزی تناوبی
۸۶	۵-۲ جستجوی حالت‌گذار
۸۷	۵-۲-۱ تابعیت ویژه‌بردار
۸۸	۵-۲-۲ گذار همزمان
۸۹	فصل ششم - دینامیک مولکولی
۹۰	۶-۱ الگوریتم انتگرالگیری

- ۹۱-۱-۶ طول شبیه‌سازی‌ها..... ۹۱
- ۹۱-۱-۶ ذخیره انرژی..... ۹۱
- ۹۲-۲-۶ کنترل دما..... ۹۲
- ۹۳-۳-۶ تناوب‌های شبیه‌سازی..... ۹۳
- ۹۳-۱-۳-۶ شرایط اولیه و گرمایش..... ۹۳
- ۹۴-۲-۳-۶ تعادل و جمع‌آوری داده‌ها..... ۹۴
- ۹۵-۱-۲-۳-۶ آزمون‌های تعادل..... ۹۵
- ۹۵-۲-۲-۳-۶ اثر حلال بر تعادل..... ۹۵
- ۹۵-۳-۲-۳-۶ جمع‌آوری داده‌ها..... ۹۵
- ۹۶-۳-۳-۶ سرمایش..... ۹۶
- ۹۶-۴-۶ مثال‌هایی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی..... ۹۶
- ۹۷-۵-۶ تدابیر..... ۹۷
- ۹۷-۱-۵-۶ دمای ثابت در مقابل انرژی ثابت..... ۹۷
- ۹۸-۲-۵-۶ جستجوی صورتبندی..... ۹۸
- ۹۸-۱-۲-۵-۶ دینامیک خاموش..... ۹۸
- ۹۹-۲-۲-۵-۶ شبیه‌سازی سرمایش آرام..... ۹۹
- ۹۹-۳-۲-۵-۶ عملکرد تصادفی در طی دینامیک مولکولی..... ۹۹
- ۱۰۰-۴-۲-۵-۶ فرکانس نمونه‌برداری..... ۱۰۰
- ۱۰۱-۵-۲-۵-۶ چه زمانی فضای صورتبندی برای نمونه‌برداری کافی است؟..... ۱۰۱
- ۱۰۱-۶-۶ کاربرد تحدیدهای هندسی..... ۱۰۱
- ۱۰۲-۱-۶-۶ کاربرد داده‌های تجربی به صورت تحدیدها..... ۱۰۲
- ۱۰۲-۲-۶-۶ برش عرضی سدهای انرژی..... ۱۰۲
- ۱۰۳-۳-۶-۶ حد تغییرات صورتبندی در شبیه‌سازی‌های بادمای بالا..... ۱۰۳
- ۱۰۳-۴-۶-۶ مولکول‌های داکینگ..... ۱۰۳
- ۱۰۳-۷-۶ منجمد کردن بخشی از یک سیستم..... ۱۰۳
- ۱۰۴-۸-۶ شبیه‌سازی‌های حلال..... ۱۰۴
- ۱۰۵-۱-۸-۶ انتخاب ثابت دی‌الکتریک..... ۱۰۵
- ۱۰۵-۲-۸-۶ اثرات روی حرکت دینامیکی..... ۱۰۵

۹-۶	جمع میانگین‌ها از شبیه‌سازی	۱۰۵
۱-۹-۶	ارزیابی پایداری و تعادل	۱۰۶
۱-۱-۹-۶	شبیه‌سازی‌های انرژی ثابت	۱۰۶
۲-۱-۹-۶	شبیه‌سازی‌های درجه حرارت ثابت	۱۰۷
۲-۹-۶	تحقیقات صورت‌بندی	۱۰۸
۱۰-۶	تنظیم یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۱۰۸
۱-۱۰-۶	زمان گرمایش	۱۰۸
۲-۱۰-۶	شبیه‌سازی یا زمان اجرا	۱۰۹
۳-۱۰-۶	زمان سرمایش آرام	۱۰۹
۴-۱۰-۶	اندازه گام	۱۱۰
۵-۱۰-۶	درجه حرارت	۱۱۱
۱۱-۶	شکستن پیوند	۱۱۱

فصل هفتم - دینامیک لانگوین و مونت کارلو

۱-۷	دینامیک لانگوین	۱۱۳
۱-۱-۷	الگوریتم انتگرالگیری	۱۱۴
۲-۱-۷	تنظیم شبیه‌سازی دینامیکی لانگوین	۱۱۵
۱-۲-۱-۷	زمان گرمایش، زمان اجرا و زمان سرمایش	۱۱۵
۲-۲-۱-۷	گام زمانی	۱۱۵
۳-۲-۱-۷	درجه حرارت	۱۱۶
۴-۲-۱-۷	درجه حرارت ثابت در برابر انرژی ثابت	۱۱۶
۵-۲-۱-۷	ضریب اصطکاک	۱۱۶
۲-۷	شبیه‌سازی‌های مونت کارلو	۱۱۷
۱-۲-۷	مقدمه	۱۱۷
۲-۲-۷	پیش‌زمینه و روش	۱۱۸
۳-۲-۷	میرهای مونت کارلو و پارامترهای شبیه‌سازی	۱۱۹
۱-۳-۲-۷	پیکربندی‌های اولیه	۱۱۹
۲-۳-۲-۷	درجه حرارت	۱۲۰

۱۲۰-۲-۳-۳ اندازه گام و نسبت قابل قبول ۱۲۰

۱۲۰-۲-۳-۴ فاز اولیه و تعادل ۱۲۰

۱۲۱-۲-۳-۵ تعادل و میانگین گیری آماری ۱۲۱

۱۲۱-۲-۳-۶ گومایش و سرمایش ۱۲۱

فصل هشتم - کاربرد روش های مکانیک مولکولی ۱۲۳

۱-۸ در دسترس بودن پارامترها ۱۲۳

۲-۸ ویژگی های میدان نیرو ۱۲۳

۱-۲-۸ MM+ ۱۲۴

۲-۲-۸ برهمکنش های الکترو استاتیک ۱۲۵

۳-۸ دقت میدان های نیرو ۱۲۵

۴-۸ تجارب قبلی ۱۲۶

۵-۸ انتخاب گزینه های میدان نیرو ۱۲۶

۱-۵-۸ تابع دی الکتریک ۱۲۶

۲-۵-۸ فاکتورهای مقیاس غیر پیوندی ۱-۴ ۱۲۶

۳-۵-۸ برش های غیر پیوندی ۱۲۷

۶-۸ محدودیت ها ۱۲۸

فصل نهم - کاربرد روش های مکانیک کوانتومی ۱۲۹

۱-۹ به دست آوردن ساختار اولیه ۱۲۹

۱-۱-۹ محاسبه بخشی از یک سیستم مولکولی ۱۳۰

۲-۹ نصب گزینه ها ۱۳۱

۱-۲-۹ انتخاب گزینه ها برای روش آغازین ۱۳۱

۱-۱-۲-۹ انتخاب یک مجموعه پایه ۱۳۱

۲-۱-۲-۹ افزودن تابع پایه اضافی ۱۳۳

۳-۱-۲-۹ بکار بردن یک مجموعه پایه ۱۳۳

۴-۱-۲-۹ بار و چندگانگی اسپین ۱۳۳

۵-۱-۲-۹ معیارهای همگرایی ۱۳۴

- ۹-۲-۱-۶ UHF در برابر RHF ۱۳۴
- ۹-۲-۱-۷ شتاب همگرایی ۱۳۵
- ۹-۲-۱-۸ محاسبه گرادیان ۱۳۵
- ۹-۲-۱-۹ محاسبه انرژی همبستگی MP2 ۱۳۵
- ۹-۲-۱-۱۰ انتگرال‌های دافعه دو الکترونی ۱۳۶
- ۹-۲-۱-۱۱ برش انتگرال دو الکترونی ۱۳۶
- ۹-۲-۱-۱۲ اندازه بافر انتگرال دو الکترونی ۱۳۶
- ۹-۲-۱-۱۳ فرمت انتگرال دو الکترونی با قاعده ۱۳۶
- ۹-۲-۱-۱۴ فرمت انتگرال دو الکترونی رفتی ۱۳۷
- ۹-۲-۱-۱۱ محاسبه SCF مستقیم ۱۳۷
- ۹-۲-۱-۱۲ حدس اولیه ضرایب MO ۱۳۸
- ۹-۲-۱-۱۳ تعداد اربیتال‌های d ۱۳۸
- ۹-۲-۱-۱۴ اتم‌های شبح ۱۳۹
- ۹-۲-۱-۱۵ برهمکنش پیکربندی ۱۳۹
- ۹-۲-۲-۱ انتخاب گزینه‌ها برای روش توسعه یافته هوکل ۱۴۰
- ۹-۲-۲-۱ بار و چندگانگی اسپین ۱۴۰
- ۹-۲-۲-۲ ثابت هوکل ۱۴۰
- ۹-۲-۲-۳ اربیتال‌های d ۱۴۱
- ۹-۲-۲-۳ انتخاب گزینه‌هایی برای روش‌های NDO ۱۴۱
- ۹-۲-۳-۱ معیارهای همگرایی ۱۴۱
- ۹-۲-۳-۲ بار، اسپین و حالت برانگیخته ۱۴۲
- ۹-۲-۳-۴ UHF در برابر RHF ۱۴۲
- ۹-۲-۳-۵ شتاب همگرایی ۱۴۲
- ۹-۲-۳-۶ برهمکنش پیکربندی ۱۴۳
- ۹-۲-۴ فایل ثبت وقایع برای نتایج ۱۴۳
- ۹-۳-۱ انواع محاسبات ۱۴۴
- ۹-۳-۱ محاسبات تک نقطه و CI ۱۴۴
- ۹-۳-۲ روش‌های بهینه‌سازی ۱۴۵

- ۳-۳-۹ جستجوی حالت‌گذار ۱۴۶
- ۴-۳-۹ دینامیک مولکولی ۱۴۶
- ۱-۴-۳-۹ پایداری انرژی در محاسبات دینامیک مولکولی ۱۴۷
- ۵-۳-۹ ارتعاشات ۱۴۷
- ۶-۳-۹ نمودارهای کرانه‌ای و اربیتال‌ها ۱۴۷
- ۷-۳-۹ طیف ارتعاشی ۱۴۸
- ۸-۳-۹ طیف الکترونی ۱۴۸
- ۹-۳-۹ ذخیره اطلاعات در یک فایل ثبت وقایع ۱۴۸
- ۴-۹ روش توسعه یافته هوکل ۱۴۹
- ۱-۴-۹ محدودیت‌های روش توسعه یافته هوکل ۱۴۹
- ۵-۹ روش‌های NDO ۱۵۰
- ۱-۵-۹ تعریف برهمکنش‌های الکترون-الکترون ۱۵۰
- ۲-۵-۹ رفتار برهمکنش‌های الکترون-الکترون ۱۵۱
- ۱-۲-۵-۹ روش‌های CNDO, INDO, MINDO/3, ZINDO/1 و ZINDO/S ۱۵۱
- ۲-۲-۵-۹ روش‌های AM1, MNDO و PM3 ۱۵۲
- ۳-۵-۹ کاربردهای عملی روش‌های NDO ۱۵۲
- ۱-۳-۵-۹ پارامتری کردن ۱۵۲
- ۶-۹ نتایج محاسبات نیمه تجربی ۱۵۴
- ۱-۶-۹ انرژی مولکول‌ها ۱۵۴
- ۲-۶-۹ هندسه‌های مولکول‌ها ۱۵۷
- ۳-۶-۹ انرژی‌های حالت‌های گذار ۱۵۷
- ۴-۶-۹ انرژی‌های اربیتال مولکولی و پتانسیل‌های یونیزاسیون ۱۵۸
- ۵-۶-۹ ممان‌های دو قطبی ۱۵۹
- ۶-۶-۹ پتانسیل الکترواستاتیک ۱۶۰
- ۷-۶-۹ بارهای اتمی ۱۶۲
- ۸-۶-۹ واکنش پذیری شیمیایی ۱۶۳
- ۱-۸-۶-۹ بارهای اتمی و واکنش پذیری ۱۶۵
- ۲-۸-۶-۹ اربیتال‌های مولکولی مرزی ۱۶۵

۱۶۸	۹-۶-۹ آنالیز ارتعاشی و طیف‌سنجی مادون قرمز
۱۶۹	۹-۶-۹-۱ مشخصه تجربی فرکانس‌های اصلی مادون قرمز
۱۷۱	۹-۶-۱۰ طیف‌های ماوراءبنفش- مرئی
۱۷۲	۹-۷-۷ انتخاب یک روش نیمه تجربی
۱۷۲	۹-۷-۱ هوکل توسعه یافته
۱۷۳	۹-۷-۲ CNDO
۱۷۳	۹-۷-۳ INDO
۱۷۳	۹-۷-۴ MINDO/3
۱۷۴	۹-۷-۵ MNDO
۱۷۴	۹-۷-۶ AM1
۱۷۵	۹-۷-۷ PM3
۱۷۵	۹-۷-۸ ZINDO/I
۱۷۶	۹-۷-۹ ZINDO/S
۱۷۶	۸-۹ مطالعه بیشتر

۱۷۷	بخش دوم: تئوری و روش‌ها
۱۷۹	فصل دهم - مقدمه‌ای بر تئوری و روش‌ها
۱۷۹	۱۰-۱ طراحی HyperChem
۱۸۰	۱۰-۱-۱ مرزهای پستی
۱۸۲	۱۰-۲ فلسفه HyperChem
۱۸۳	۱۰-۳ پیش‌زمینه‌ای درباره شیمی محاسباتی
۱۸۳	۱۰-۳-۱ سطح انرژی پتانسیل
۱۸۵	۱۰-۳-۱-۱ تک نقطه
۱۸۵	۱۰-۳-۱-۲ بهینه‌سازی هندسی
۱۸۵	۱۰-۳-۱-۳ دینامیک مولکولی
۱۸۶	۱۰-۳-۲ تقریب بورن-اپنهایمر
۱۸۶	۱۰-۳-۲-۱ تابع هامیلتونی برای مجموعه‌ای از الکترون‌ها و هسته‌ها
۱۸۷	۱۰-۳-۲-۲ هامیلتونی الکترونی

۱۸۷	۱۰-۳-۲-۳ هامیلتونی هسته‌ای
۱۸۹	۱۰-۳-۳ مکانیک مولکولی در مقابل مکانیک کوانتومی
۱۹۰	۱۰-۳-۴ مکانیک کلاسیکی روی سطح انرژی پتانسیل
۱۹۰	۱۰-۳-۵ مولدهای نیرو-انرژی

فصل یازدهم - مکانیک مولکولی

۱۹۱	۱۱-۱ پیش‌زمینه
۱۹۳	۱۱-۲ انواع اتم
۱۹۳	۱۱-۲-۱ تعریف نوع اتم
۱۹۵	۱۱-۲-۲ قوانین نوعی
۱۹۷	۱۱-۲-۳ تعیین مجدد یا افزایش انواع
۱۹۸	۱۱-۳ میدان‌های نیرو
۱۹۸	۱۱-۳-۱ پیش‌زمینه
۱۹۸	۱۱-۳-۱-۱ عبارات انرژی پتانسیل
۱۹۹	۱۱-۳-۱-۱-۱ کشش پیوند
۲۰۰	۱۱-۳-۱-۱-۲ خمش زاویه پیوند
۲۰۰	۱۱-۳-۱-۱-۳ دو وجهی‌ها
۲۰۰	۱۱-۳-۱-۱-۴ دو وجهی‌های نامناسب
۲۰۱	۱۱-۳-۱-۱-۵ واندروالس
۲۰۴	۱۱-۳-۱-۱-۶ الکترواستاتیک
۲۰۴	۱۱-۳-۱-۱-۷ پیوند هیدروژنی
۲۰۵	۱۱-۳-۱-۲ ثابت‌های دی‌الکتریک مؤثر
۲۰۶	۱۱-۳-۱-۳ برش‌ها
۲۰۷	۱۱-۳-۱-۴ عبارات برهمکنش‌های مجاور ۱-۴
۲۰۷	۱۱-۳-۲ MM+
۲۰۸	۱۱-۳-۲-۱ واحدها
۲۰۹	۱۱-۳-۲-۲ کشش پیوند
۲۱۰	۱۱-۳-۲-۳ دو قطبی‌های پیوند

۲۱۱	 خمش زاویه ۴-۲-۳-۱۱
۲۱۲	 عبارت مقطعی کشش پیوند و خمش زاویه ۵-۲-۳-۱۱
۲۱۳	 خمش خارج از صفحه ۶-۲-۳-۱۱
۲۱۳	 دو وجهی ها ۷-۲-۳-۱۱
۲۱۴	 واندروالسی ۸-۲-۳-۱۱
۲۱۵	 AMBER ۳-۳-۱۱
۲۱۵	 کشش پیوند ۱-۳-۳-۱۱
۲۱۶	 خمش زاویه ۲-۳-۳-۱۱
۲۱۶	 دو وجهی ها ۳-۳-۳-۱۱
۲۱۶	 دو وجهی های نامناسب ۴-۳-۳-۱۱
۲۱۷	 واندروالسی ۵-۳-۳-۱۱
۲۱۷	 الکترواستاتیک ۶-۳-۳-۱۱
۲۱۸	 پیوند هیدروژنی ۷-۳-۳-۱۱
۲۱۸	 جفت های تک ۸-۳-۳-۱۱
۲۱۸	 OPLS ۴-۳-۱۱
۲۱۹	 واندروالسی ۱-۴-۳-۱۱
۲۲۰	 الکترواستاتیک ۲-۴-۳-۱۱
۲۲۰	 BIO+ ۵-۳-۱۱
۲۲۱	 کشش پیوند ۱-۵-۳-۱۱
۲۲۱	 خمش زاویه ۲-۵-۳-۱۱
۲۲۱	 دو وجهی ها ۳-۵-۳-۱۱
۲۲۲	 دو وجهی های نامناسب ۴-۵-۳-۱۱
۲۲۲	 واندروالسی ۵-۵-۳-۱۱
۲۲۳	 الکترواستاتیک ۶-۵-۳-۱۱
۲۲۴	 پیوند هیدروژنی ۷-۵-۳-۱۱
۲۲۴	 مجموعه پارامترها ۴-۱۱
۲۲۵	 شکل متنی یا DBF برای پارامترها ۱-۴-۱۱
۲۲۶	 اصلاح مجموعه پارامترهای موجود ۲-۴-۱۱

۲۲۶	۱۱-۴-۳ تولید مجموعه پارامترهای جدید
۲۲۷	۱۱-۵-۵ تدوین و جمع‌آوری پارامترها
۲۲۷	۱۱-۵-۱ تنظیم Registry یا Chem.ini برای گزینه‌های میدان نیرو
۲۲۹	۱۱-۶-۶ شرایط مرزی تناوبی و حلال
۲۳۰	۱۱-۶-۱ شرایط مرزی تناوبی
۲۳۱	۱۱-۶-۲ جعبه آب تعادلی
۲۳۱	۱۱-۶-۳ جزئیاتی از روش حلال‌پوشی
۲۳۱	۱۱-۷-۷ تحدیدها
۲۳۲	۱۱-۷-۱ تعریف یک تحدید
۲۳۲	۱۱-۷-۲ افزودن تحدیدها
۲۳۳	۱۱-۸-۸ پیش فرض میدان نیروی MM+
۲۳۴	۱۱-۸-۱ شیوه کاراکتر عام
۲۳۵	۱۱-۸-۲ پیش فرض میدان نیرو
۲۳۶	۱۱-۸-۲-۱ هیبریداسیون تقریبی
۲۳۸	۱۱-۸-۲-۲ کشش پیوند
۲۳۹	۱۱-۸-۲-۲-۱ پارامترها برای بوتادین و مولکول‌های وابسته
۲۴۰	۱۱-۸-۲-۳ خمش زاویه
۲۴۰	۱۱-۸-۲-۴ کشش‌ها-خمش‌ها
۲۴۰	۱۱-۸-۲-۵ خمش‌های خارج از صفحه
۲۴۱	۱۱-۸-۲-۶ پیچش‌ها
۲۴۱	۱۱-۸-۲-۶-۱ پیوندهای ساده
۲۴۲	۱۱-۸-۲-۶-۲ پیوندهای دوگانه
۲۴۲	۱۱-۸-۲-۷ الکترواستاتیک
۲۴۲	۱۱-۸-۲-۸ واندروالس

فصل دوازدهم - مکانیک کوانتومی ۲۴۳

۲۴۵	۱۲-۱ پیش زمینه
۲۴۵	۱۲-۱-۱ راه حل‌های تقریبی معادله شرودینگر

۲۴۶	۱۲-۱-۲ بار و چندگانگی
۲۴۷	۱۲-۲ روش‌های الکترون مستقل
۲۴۷	۱۲-۲-۱ تقریب الکترون مستقل
۲۴۸	۱۲-۲-۲ اربیتال‌های مولکولی
۲۴۸	۱۲-۲-۳ دیاگرام‌های انرژی اربیتالی
۲۴۹	۱۲-۲-۴ تقریب MO-LCAO
۲۵۰	۱۲-۲-۵ معادلات ماتریس برای اربیتال‌های مولکولی
۲۵۱	۱۲-۲-۶ حل اربیتال‌های مولکولی
۲۵۲	۱۲-۳ روش‌های میدان خودسازگار
۲۵۲	۱۳-۳-۱ روش هارتری-فاک
۲۵۲	۱۲-۳-۲ معادلات روتان
۲۵۳	۱۲-۳-۳ جفت شدن اسپین
۲۵۵	۱۲-۳-۴ معادلات پاپل - نسبت نامحدود
۲۵۷	۱۲-۳-۵ همگرایی
۲۵۸	۱۲-۳-۶ جفت شدن اسپین - محدود یا نامحدود؟
۲۶۰	۱۲-۳-۷ حالت‌های الکترونی
۲۶۳	۱۲-۴ محاسبات پس از میدان خود سازگار
۲۶۳	۱۲-۴-۱ برهمکنش پیکربندی
۲۶۵	۱۲-۴-۲ انرژی همبستگی MP2
۲۶۷	۱۲-۵ صرفنظر از تقریب همپوشانی دیفرانسیلی
۲۶۸	۱۲-۶ ویژگی‌های تابع موج
۲۶۹	۱۲-۶-۱ نمودارهای کرانه‌ای
۲۷۰	۱۲-۶-۲ دانسیته الکترونی کل
۲۷۱	۱۲-۶-۳ دانسیته اسپین
۲۷۲	۱۲-۶-۴ نمودارهای اربیتالی
۲۷۳	۱۲-۶-۵ پتانسیل الکترواستاتیک
۲۷۴	۱۲-۷ کوانتوم ترکیبی / مدل کلاسیکی
۲۷۵	۱۲-۷-۱ انتخاب مرز کلاسیکی - کوانتومی

۲۷۶	۱۲-۷-۲ پوشش اتم‌ها و پارامترهایشان
۲۷۸	۱۲-۸ روش‌های حمایت شده
۲۷۹	۱۲-۸-۱ روش آغازین
۲۸۱	۱۲-۸-۱-۱ توابع گوسی اولیه بهنجار شده
۲۸۲	۱۲-۸-۱-۲ توابع گوسی انتقاضی
۲۸۲	۱۲-۸-۱-۳ مجموعه‌های پایه کمینه: STO-3G
۲۸۶	۱۲-۸-۱-۴ توابع پایه ظرفیت - شکافته
۲۸۹	۱۲-۸-۱-۵ مجموعه‌های پایه قطبی
۲۹۱	۱۲-۸-۱-۶ انتگرال‌های دو الکترونی
۲۹۲	۱۲-۸-۱-۶-۱ شکل انتگرال منظم
۲۹۲	۱۲-۸-۱-۶-۲ شکل انتگرال رافنتی
۲۹۳	۱۲-۸-۱-۶-۳ برش انتگرال دو الکترونی
۲۹۴	۱۲-۸-۱-۷ محاسبه مستقیم SCF
۲۹۵	۱۲-۸-۱-۸ حدس اولیه ضرایب MO
۲۹۵	۱۲-۸-۱-۸-۱ هوکل تصویر شده
۲۹۵	۱۲-۸-۱-۸-۲ CNDO/INDO تصویر شده
۲۹۶	۱۲-۸-۱-۹ مدل ترکیبی
۲۹۶	۱۲-۸-۱-۱۰ اتم‌های شبح
۲۹۷	۱۲-۸-۲ تنوری هوکل توسعه یافته
۲۹۷	۱۲-۸-۲-۱ روش پایه
۲۹۸	۱۲-۸-۲-۲ ارزیابی‌های اتمی ظرفیت
۳۰۰	۱۲-۸-۲-۳ عناصر ماتریس هامیلتونی
۳۰۱	۱۲-۸-۲-۴ انتخاب یک ثابت هوکل
۳۰۲	۱۲-۸-۲-۵ مدل ترکیبی
۳۰۲	۱۲-۸-۲ CNDO
۳۰۳	۱۲-۸-۲-۱ معادلات CNDO
۳۰۵	۱۲-۸-۲-۲ مقادیر چشم‌داشتی
۳۰۵	۱۲-۸-۲-۳ مدل ترکیبی (INDO و CNDO)

۳۰۶	۱۲-۸-۴ INDO
۳۰۶	۱۲-۹-۴ پدیده‌های تبادل
۳۰۷	۱۲-۸-۴-۲ اختلافات میان CNDO و INDO
۳۰۹	۱۲-۸-۴-۳ برهمکنش‌های اسپینی در INDO
۳۰۹	۱۲-۸-۵ MINDO/3
۳۱۱	۱۲-۸-۵-۱ انتگرال‌های دو مرکزی - دو الکترونی
۳۱۱	۱۲-۸-۵-۲ انتگرال یک مرکزی - یک الکترونی H_{ii}
۳۱۲	۱۲-۸-۵-۳ انتگرال دو مرکزی - یک الکترونی H_{ij} (انتگرال رزونانس)
۳۱۲	۱۲-۸-۵-۴ انتگرال یک مرکزی - دو الکترونی
۳۱۲	۱۲-۸-۶-۵ انتگرال‌های دافعه مغزی - مغزی
۳۱۳	۱۲-۸-۵-۶ مدل ترکیبی
۳۱۴	۱۲-۸-۶ MINDO
۳۱۶	۱۲-۸-۶-۱ انتگرال‌های دو مرکزی - دو الکترونی
۳۲۰	۱۲-۸-۶-۲ انتگرال تک مرکزی - تک الکترونی H_{ii}
۳۲۰	۱۲-۸-۶-۳ انتگرال دو مرکزی - تک الکترونی
۳۲۰	۱۲-۸-۶-۴ انتگرال‌های تک مرکزی - دو الکترونی
۳۲۲	۱۲-۸-۶-۵ انتگرال‌های دافعه مغزی - مغزی
۳۲۲	۱۲-۸-۶-۶ مدل ترکیبی (AM1, MNDO و PM3)
۳۲۳	۱۲-۸-۷ AM1 و PM3
۳۲۵	۱۲-۸-۸ ZINDO/1
۳۲۵	۱۲-۸-۸-۱ فاکتورهای وزنی همپوشانی
۳۲۶	۱۲-۸-۸-۲ مدل ترکیبی
۳۲۷	۱۲-۸-۹ ZINDO/S
۳۲۸	۱۲-۸-۹-۱ مدل ترکیبی

فصل سیزدهم - گزینه‌های محاسباتی ۳۲۹

۱۳-۱ تک نقاط روی یک سطح انرژی پتانسیل ۳۲۹

۱۳-۲ کمینه‌های موضعی روی سطح انرژی پتانسیل ۳۳۱

- ۳۳۲..... ۱-۲-۱۳ بهینه‌سازی هندسی بدون قید
- ۳۳۳..... ۲-۲-۱۳ روش‌های بهینه‌سازی
- ۳۳۳..... ۱-۲-۲-۱۳ کاهش شیب‌تند
- ۳۳۴..... ۲-۲-۲-۱۳ روش‌های گرادینان مزدوج
- ۳۳۵..... ۳-۲-۲-۱۳ فلتچر-ریوز
- ۳۳۶..... ۴-۲-۲-۱۳ پلاک-ریبیرز
- ۳۳۶..... ۵-۲-۲-۱۳ روش‌های نیوتن-رافسون
- ۳۳۶..... ۶-۲-۲-۱۳ قطری-بلوکی نیوتن-رافسون
- ۳۳۷..... ۳-۱۳ ساختارهای گذار روی یک سطح انرژی پتانسیل
- ۳۳۸..... ۱-۳-۱۳ روش‌های جستجوی حالت‌های گذار
- ۳۳۸..... ۱-۱-۳-۱۳ روش پیروی از ویژه‌بردار
- ۳۳۹..... ۲-۱-۳-۱۳ روش گذار همزمان
- ۳۴۰..... ۴-۱۳ دینامیک‌های مولکولی روی یک سطح انرژی پتانسیل
- ۳۴۰..... ۱-۴-۱۳ درجه حرارت
- ۳۴۱..... ۲-۴-۱۳ میانگین‌گیری آماری
- ۳۴۱..... ۱-۲-۴-۱۳ پیش‌زمینه
- ۳۴۱..... ۱-۱-۲-۴-۱۳ معادلات حرکت نیوتن
- ۳۴۲..... ۲-۱-۲-۴-۱۳ الگوریتم خیز به خیز
- ۳۴۲..... ۳-۱-۲-۴-۱۳ میانگین مکانیک آماری
- ۳۴۳..... ۲-۲-۴-۱۳ سرعت‌های تصادفی با سرعت‌های شروع مجدد
- ۳۴۴..... ۳-۲-۴-۱۳ فازهای پایه یک خط سیر
- ۳۴۴..... ۱-۳-۲-۴-۱۳ گام زمانی اساسی
- ۳۴۵..... ۲-۳-۲-۴-۱۳ گرمایش و سرمایش
- ۳۴۷..... ۳-۳-۲-۴-۱۳ تعادل در دمای T
- ۳۴۷..... ۴-۳-۲-۴-۱۳ جمع‌آوری داده‌ها
- ۳۴۸..... ۴-۲-۴-۱۳ دینامیک آزاد یا دینامیک دمای ثابت
- ۳۴۹..... ۵-۲-۴-۱۳ دوره‌های داده‌ها، میانگین‌گیری، تصویر لحظه‌ای و تجدید صفحه نمایش
- ۳۴۹..... ۱-۵-۲-۴-۱۳ دوره جمع‌آوری داده‌ها

۳۴۹	 دوره میانگین‌گیری آماری. ۲-۵-۲-۴-۱۳
۳۵۰	 دوره جمع‌آوری تصویر لحظه‌ای. ۲-۵-۲-۴-۱۳
۳۵۰	 دوره تجدید صفحه نمایش. ۴-۵-۲-۴-۱۳
۳۵۰	 میانگین‌گیری داده‌های فعال و ساختاری ۶-۲-۴-۱۳
۳۵۱	 میانگین‌گیری مقادیر انرژی. ۱-۶-۲-۴-۱۳
۳۵۲	 میانگین‌گیری انتخاب‌های مشخص. ۲-۶-۲-۴-۱۳
۳۵۳	 مشتق از میانگین. ۳-۶-۲-۴-۱۳
۳۵۴	 CSV فایل ۴-۶-۲-۴-۱۳
۳۵۴	 توزیع مقادیر لحظه‌ای در امتداد خط سیر. ۷-۲-۴-۱۳
۳۵۵	 بدست آوردن و درک نمودارهای MD ۱-۷-۲-۴-۱۳
۳۵۶	 گذاردن نمودارها در دیگر اسناد ۲-۷-۲-۴-۱۳
۳۵۶	 جمع‌آوری خط سیر برای خواندن داده بعدی ۸-۲-۴-۱۳
۳۵۷	 ایجاد یک فایل لحظه‌ای (SNP). ۱-۸-۲-۴-۱۳
۳۵۸	 خواندن یک فایل (HIN.SNP) برای بازنواخت ۲-۸-۲-۴-۱۳
۳۵۹	 کمینه مطلق در یک سطح انرژی پتانسیل. ۳-۴-۱۳
۳۵۹	 تابکاری شبیه‌سازی شده. ۱-۳-۴-۱۳
۳۶۰	 واکنش‌های ساده‌روی یک سطح انرژی پتانسیل ۴-۴-۱۳
۳۶۱	 تجزیه و تحلیل مسیر ۱-۴-۴-۱۳
۳۶۲	 تنظیم مختصات اولیه و سرعت‌ها ۲-۴-۴-۱۳
۳۶۲	 توجه به دما. ۳-۴-۴-۱۳
۳۶۳	 توجه به HF/UHF ۴-۴-۴-۱۳
۳۶۴	 طیف‌بینی مرئی-ماوراءبنفش ۵-۱۳
۳۶۵	 آنالیز ارتعاشی و طیف‌بینی IR ۶-۱۳
۳۶۵	 محاسبه ارتعاشی ۱-۶-۱۳
۳۶۶	 تجزیه و تحلیل مختصات نرمال ۲-۶-۱۳
۳۶۹	 جذب مادون قرمز ۳-۶-۱۳
۳۷۳	 منابع