

سری درسهای علوم و تحقیقات (۵)

مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی

آموزش Arguslab

تالیف و ترجمه:

مجید منجمی

(عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات)

فاطمه ملازمین

(عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد قم)

سیما افشارنژاد

(عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد مشهد)

سرشناسه	: منجمی، مجید، ۱۳۳۶.
عنوان و نام پدیدآور	: آموزش Arguslab / تالیف و ترجمه: مجید منجمی، فاطمه ملا امین، سیما افشار نژاد
مشخصات نشر	: تهران : مجید منجمی، فاطمه ملا امین، سیما افشار نژاد، ۱۳۸۶.
مشخصات ظاهری	: ۱۳۱ ص.: مصور.
فروست	: سری درسهای علوم و تحقیقات؛ ۵.
شابک	: 978-964-04-1376-0
وضعیت فهرست نویسی: فیپا	
یادداشت	: بالای عنوان: مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی.
عنوان دیگر	: مباحث نوین در مکانیک مولکولی و کوانتومی
موضوع	: ساختار مولکولی - نرم افزار.
موضوع	: شیمی فیزیک - داده پردازی .
شناسه افزوده	: ملا امین ، فاطمه ، ۱۳۵۳ .
شناسه افزوده	: افشار نژاد، سیما
رده بندی کنگره	: QD۴۶۱/م۸۱۸۱۳۸۶
رده بندی دیویی	: ۵۴۱/۲۲
شماره کتابشناسی ملی	: ۱۱۷۶۴۳۸

نام کتاب : آموزش Arguslab.

تالیف و ترجمه : مجید منجمی، فاطمه ملا امین، سیما افشار نژاد.

چاپ اول : بهار ۱۳۸۷

چاپ : دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات

شابک : ISBN 978-964-04-1376-0

قیمت : ۳۰۰۰۰ ریال

پیشگفتار

بی گمان پنجاه سال پیش که نخستین کامپیوترها پا به عرصه علم و فن آوری گذاشتند هیچ کس حتی تصور هم نمی کرد روزی فرا برسد که علوم تجربی همچون شیمی فیزیک و حتی زیست شناسی تا این حد وابسته به مباحث پیشرفته در زمینه روش های تئوری باشد. 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 می شود موید این ادعا است.

اما نکته حائز اهمیت که می بایستی تمامی محققان به آن بیش از پیش پردازند، نگرش به علوم بین رشته ای و تلفیقی است.

لذا بر آن شدیم تا جهت استفاده هر چه 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 می باشند.

مجموعه مطالب گردآوری شده توسط گروه تحقیقاتی ما در قالب یک سری مباحث پیشرفته به تدریج تحت عناوین خاص چاپ می گردد.

سری (۱) این مجموعه تحت عنوان تانسورهای پوشیدگی رزونانس مغناطیسی

هسته ای، سری (۲) روشهای محاسبات ترکیبی کوانتوم مکانی - مولکولار مکانیک،

سری (۳) خشتهای شیمی محاسباتی: "مروری بر مجموعه توابع پایه" و سری (۴) طراحی و

شبیه سازی با استفاده از روشهای مکانیک مولکولی - دینامیک مولکولی منتشر گردید. هم اکنون

سری (۵)، یعنی کتاب حاضر یک نرم افزار محاسباتی برای روشهای طراحی و شبیه سازی 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

بدرفه راهی که گشوده ایم، نمایید.

انشا ...

مولفان