



آموزش پایه برنامه‌های نرم‌افزاری در شیمی محاسباتی  
(Sigma Plot, AIM, GaussView, HyperChem Gaussian)

مؤلفان:

دکتر اسراف السادات قاسمی

(عضو هیات علمی دانشگاه پیام نور)

سیده فاطمه سیدی دارابی

(مدرس دانشگاه پیام نور)

فاطمه عباسی رسمی

آتنا صیامی

نفیسه معتمدی فر

کار و دانشگاه

۱۳۹۵

عنوان و نام پدید آورندگان: آموزش پایه برنامه‌های نرم‌افزاری در شیمی محاسباتی  
(Sigma Plot, AIM, GaussView, HyperChem, Gaussian) /

مشخصات نشر: ساری، انتشارات کار و دانشگاه ۱۳۹۵

مشخصات ظاهری: ۱۴۸ ص: مصور، جدول، نمودار

978-600-7851-33-3

موضوع: شیمی نرم افزار شیمی محاسباتی

شناسه خزود: حاسد، الحرف السادات ۱۳۴۹

رده بندی کلاس ۱۳۹۵ ۸۱/۳۱۴۰۵

رده بندی دیوپی: ۵۰۰

شماره کتابشناسی ملی: ۲۷۰۲۷



آموزش پایه برنامه‌ریزی نرم‌افزاری در شیمی محاسباتی

(Sigma Plot, AIM, GaussView, HyperChem, Gaussian)

دکتر اشرف السادات قاسمی، سیدہ فاطمہ سفیعی، فاطمہ عباسی رستمی، آتنا

صيامی، نفیسہ معتمدی و

ویراستار: سیده فاطمہ شفیعی دا بے

نوبت چاپ: اول - ۱۳۹۵

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

ناشر: کار و دانشگاه

چاپ: کوثر

لیتوگرافی: سیده فاطمه شفیعہ دارابی

شایک: 978-600-7851-33-3

قیمت : ۱۵۰۰۰ ریال

نشانی: مازندران - ساری - خیابان ۱۸ دی - ابتدای کوچه گلها - موسسه و انتشارات کار و دانشگاه

## فهرست مطالب

### فصل اول: آموزش نرم افزار هایپرکم (HyperChem)

- معرفی نرم افزار هایپرکم (HyperChem) ..... ۹
- معرفی کلیدهای کاربردی در HyperChem ..... ۹
- روش رسم ساختار مولکول در HyperChem ..... ۳۹
- ذخیره فایل در HyperChem و ساخت فایل ورودی Gaussian در HyperChem ..... ۴۲
- ذخیره فایل در HyperChem و ساخت ورودی GaussView ..... ۴۸

### فصل دوم: آموزش نرم افزار Gaussian و GaussView

- معرفی نرم افزار ..... ۵۲
- اجرای (RUN) فایل تبدیل شده در Gaussian ..... ۵۳
- بخش های متفاوت فایل ورودی Gaussian ..... ۵۳
- اجرای دستور و انجام محاسبات در Gaussian ..... ۵۵
- اجرای (RUN) فایل تبدیل شده در GaussView ..... ۵۹
- معرفی کلیدهای کاربردی در GaussView و روش رسم ساختار مولکول ..... ۶۰
- اتان ( $C_2H_6$ ) در آن ..... ۶۰
- رسم ساختار مولکول ..... ۶۰
- اجرای برنامه در GaussView ..... ۶۴

### فصل سوم: آموزش نرم افزار Sigma Plot

امکانات و ویژگی های نرم افزار و معرفی قسمت های مختلف SigmaPlot

- ورژن ۱۲ ..... ۷۴

|          |                                                     |
|----------|-----------------------------------------------------|
| ۷۴.....  | Ribbons                                             |
| ۷۵.....  | Main Button                                         |
| ۷۷.....  | Quick Access Toolbar                                |
| ۸۱.....  | اشکال گرافیکی Sigma Plot                            |
| ۸۲.....  | ترسیم نمودار سه بعدی (3D Mesh Plot)                 |
| ۸۳.....  | تغییر نمودار چشم انداز، چرخش، و سایه (3D Mesh Plot) |
| ۸۷.....  | تنظیم داده های یک نمودار سه تایی                    |
| ۹۰.....  | Non linear Regression                               |
| ۹۱.....  | انتخاب معادله مورد استفاده                          |
| ۹۱.....  | تفسیر داده های حاصل از گرسین                        |
| ۹۲.....  | Dynamic Fit Wizard                                  |
| ۱۰۱..... | ایجاد نمودار رگرسیون جدید در Sigma Plot             |

#### فصل چهارم: آموزش نرم افزار Gaussview ۶.۰.۹

|          |                                |
|----------|--------------------------------|
| ۱۰۵..... | آموزش نصب نرم افزار Gauss View |
| ۱۱۲..... | آموزش نصب نرم افزار HyperChem  |
| ۱۱۶..... | نصب برنامه Pov Ray             |
| ۱۱۸..... | نصب کرک نرم افزار              |

#### فصل پنجم: خطاها در Gaussian

|          |                       |
|----------|-----------------------|
| ۱۲۱..... | خطای مربوط به قطع برق |
| ۱۲۱..... | خطای تعداد سیکل       |
| ۱۲۲..... | خطای مسیر             |

خطای انطباق مجموعه پایه BSSE (Basies Set Superpositin Error)

۱۲۴.....(Gaussian) وسایر خطاهادر گوسین

### فصل ششم: آموزش نرم افزار AIM

۱۲۵..... AIM فایل ورودی

۱۲۶..... روش محاسبه نقاط بحرانی

۱۲۷..... ذخیره کردن نتایج محاسبات

۱۲۸..... توصیف گر ها

۱۲۹..... نظریه اتم ها در مولکول ها (AIM)

### فصل هفتم: پیوست (مثال)

#### منابع و مأخذ

## پیشگفتار

با توجه به پیشرفت سریع علم شیمی در شاخه‌های تجربی و تئوری می‌توان به اهمیت پژوهش در هر دو زمینه پی برد. با افزایش شناخت از ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها، فرمول‌هایی برای توصیف و پیش‌بینی ساختار تعریف شدند. این معادله‌ها به مرور گسترش یافته و پیچیده‌تر شدند. این پیچیدگی به گونه‌ای شد که مطالعه یک مساله‌ی ساده بدون کمک برنامه‌های نرم‌افزاری در عمل غیر ممکن شد.

امروزه استفاده از نرم‌افزارها در کنار پیشرفت‌های علمی به دقت‌تر شدن پژوهش‌ها و کارهای علمی کمک شایسته می‌کند. لذا بر کسانی که در مسیر علم گام بر می‌دارند و تلاش می‌کنند، لازم است علاوه بر پژوهش‌های تئوری و آزمون‌های آزمایشگاهی بر این نرم‌افزارها نیز تسلط یابند.

کتاب حاضر علاوه بر نرم‌افزارهایی که در کتاب قبلی بحث شده است، به ارائه دو نرم‌افزار Sigma Plot و AIM و بحث و آموزش آن‌ها با بیانی ساده و روان برای دانشجویان پرداخته است. هدف از تهیه این کتاب آموزش و انتقال نکات کلیدی نرم‌افزارهای نامبرده می‌باشد. امید است که دانشجویان گرامی با یادگیری این نرم‌افزارها، بهره لازم را ببرند و تلاش گروه حاضر مفید واقع گردد.

دکتر اشرف السادات قاسمی - سیده فاطمه شایعی دارابی

shafeii.fateme@yahoo.com, mobina.molla@yahoo.com

## مقدمه

با پیشرفت علم و افزایش شناخت از ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها، فرمول‌هایی برای توصیف و پیش‌بینی ساختار تعریف شدند. این معادله‌ها به مرور گسترش یافته و پیچیده‌تر شدند. این پیچیدگی به گونه‌ای شد که مطالعه یک مسأله‌ی ساده بدون کمک برنامه‌های رایانه‌ای در عمل غیرممکن شد. به این دلیل در دهه‌های اخیر شاخه‌ای به نام شیمی محاسباتی به وجود آمد. در حقیقت این شاخه از شیمی توصیف شیمی به زبان ریاضی است که با استفاده از روش ریاضی توسط رایانه به انجام محاسبات منجر می‌شود. در طول زمان با پیشرفت معادلات پیشرفت سخت‌افزاری رایانه‌ها، نرم‌افزارهای متعددی برای انجام فرایندها و محاسبات معرفی شدند. در شیمی محاسباتی با استفاده از معادله‌ها به بررسی مطالبی می‌پردازیم که با استفاده از روش‌های تجربی شاید حتی با صرف هزینه و زمان بسیار نیز به آسانی قابل دست‌یافتن نیست. مطالعه ساختار مولکولی، ساختار اوربیتالی، ویژگی‌های شیمی فیزیکی، انتقال‌های الکترونی، انواع متفاوتی از طیف‌ها و بسیاری از موارد دیگر برای مولکول‌های مختلف در شرایط متفاوت که محدود به ساختارها و شرایط طبیعی و واقعی نیستند، مورد مطالعه قرار می‌گیرند. ویژگی‌ها و تئوری‌های منحصر به فرد روش‌های نظری موجب شده استفاده از آن‌ها بین گرایش‌های مختلف شیمی افزایش یابد.

نرم‌افزارهای محاسبات علمی به رغم اینکه بسیار پیچیده و متشکل از هزاران خط کد هستند، ظاهر بسیار ساده‌ای دارند. برخلاف بسیاری از نرم‌افزارها مانند ادوات و ابزارهای آفیس، نرم‌افزارهای طراحی، فتوشاپ و غیره که از تعداد زیادی منو و دکمه تشکیل شده‌اند، نرم‌افزارهای محاسباتی فاقد رابط گرافیکی اند (و یا دارای رابط گرافیکی بسیار ساده هستند). تنظیمات و اطلاعات مورد نیاز این نرم‌افزارها نه از طریق رابط گرافیکی بلکه به وسیله یک فایل ساده متنی. این نرم‌افزارها منتقل می‌شود. به صورت کلی انجام یک محاسبه علمی را می‌توان به سه مرحله تقسیم کرد:

(۱) ساخت فایل ورودی (۲) اجرای دستور محاسبه (۳) تفسیر فایل خروج

فایل ورودی برای هر نرم افزار دارای قالب (فرمت) خاص خود است و از کلمات کلیدی خاصی تشکیل شده است که به نرم افزار می گوید: برای چه ساختاری. چه محاسبه ای وبه چه نحوی انجام دهد.

همچنین در ادامه، برنامه Sigma Plot ارائه می شود که برنامه ای کاملاً حرفه ای جهت رسم نمودار و آنالیز داده ها می باشد و در مقایسه با برنامه Excel بسیار قوی تر و دارای ابزار بیشتری است. این نرم افزار مؤثرترین روش رسم نمودار برای تجزیه و تحلیل داده ها است. هرچند Sigma Plot یک نرم افزار شیمی نیست ولی برای محققان شیمی که با نمودار و آنالیز داده ها سر و کار دارند می تواند بسیار مفید باشد. البته تمامی محققانی که با داده سروکار دارند، Sigma Plot قطعاً برای آن ها مفید خواهد بود. اساتید و دانشجویان از جمله، دانشجویان در رشته های، شیمی و علوم پایه می توانند از Sigma Plot برای تحلیل داده ها استفاده کنند.

مجموعه اسناد و مدارک Sigma Plot از سه کتاب جداگانه و فایل های راهنما، سازماندهی شده تشکیل شده است. سه کتاب عبارتند از:

- *The Sigma Plot User's Guide*
- *Using Sigma Stat Software in Sigma Plot*
- *Transforms, Regressions, and Graph Analysis*

Sigma Plot User's Guide همان راهنما یا Help نرم افزار هرچه را بیشتر به ویژگی Analysis tab می پردازد و محتوای تجزیه و تحلیل در تبدیل، رگرسیون و تجزیه و تحلیل نمودار را تحت پوشش قرار می دهد.