

به نام خدا

نرم افزارهای طراحی و محاسباتی شیمی

Chemoffice, Gaussian, GaussView, Hyperchem,
AIM, NBO, VEDA, Spartan, End eNote 7

شامل:

آموزش نرم افزارهای طراحی و محاسباتی شیمی

Spartan, Hyperchem, Gaussview, Chemoffice

آموزش نرم افزارهای محاسباتی تخصصی شیمی

Gaussian, AIM, NBO

مشاهده‌ی ریز جزئیات طیف‌ها توسط نرم افزار VEDA

نرم افزار رفرنس نویسی End eNote 7

روش نصب نرم افزارها

نوشته‌ی:

صادقعلی باوفا

مونا محبوبی



سرشناسه: باوفا، صادقعلی، ۱۳۶۲ -

عنوان و نام پدیدآور: نرم‌افزارهای طراحی و محاسبات شیمی

Chemoffice, Gaussian, GaussView, Hyperchem, AIM, NBO, VEDA, Spartan, Endnote 7.../

نوشته صادقعلی باوفا، مونا محبوبی.

مشخصات نشر: تهران: اندیشه‌سرا، ۱۳۹۳.

مشخصات ظاهری: ۳۰۴ ص.: مصور، جدول، نمودار.

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۳۳۲-۰۰۷-۹

وضعیت فهرست نویسی: فیا

موضوع: نرم‌افزار گاوسی

موضوع: مولکول‌ها - الگوها -- نرم‌افزار

موضوع: ساختار مولکولی -- نرم‌افزار

موضوع: اوربیتال‌های مولکولی -- داده‌پردازی

شناسه افزوده: محبوبی، مونا

بند برگه: ۱۳۹۳ ف ۴ ب ۲ / QD۴۸۰

ردیف دیوبی: ۵۴۱/۲۲

شماره کتاب‌نویسی ملی: ۳۴۶۲۲۱۰



انتشارات اندیشه

نرم‌افزارهای طراحی و محاسبات شیمی

Chemoffice, Gaussian, GaussView, Hyperchem,
AIM, NBO, VEDA, Spartan, EndeNote 7

نوشته: صادقعلی باوفا - مونا محبوبی

چاپ اول (۱۳۹۳) شمارگان: ۱۵۰ بها: ۱۷۰۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۳۳۲-۰۰۷-۹ ISBN 978-600-332-007-9

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

تهران، میدان انقلاب، کوچه آبرو، پلاک ۲، واحد ۴۲ تلفن ۶۶۹۶۶۹۲۵ (ساعت ۹ تا ۱۴)

اندیشه‌سرا از انتشار کتاب‌های ارزشمند حمایت می‌کند.

۸۸۰۰۶۴۸۷-۰۹۱۲۳۱۶۱۶۸۷

www.andishehsara.org

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: نرم افزار کم آفیس (ChemOffice)
۹	۱-۱ معرفی نرم افزار کم آفیس (Chem Office)
۹	۱-۱-۱ معرفی کلیدهای کاربردی (ChemOffice)
۱۰	۲-۱ رسم ساختار ساده مولکول در (Chem3D Ultra)
۱۱	۳-۱ اتصال MOPAC با ChemOffice
۱۲	۴-۱ طراحی ساختار جدید توسط نرم افزار ChemDraw
۱۶	۵-۱ رسم NMR
۱۷	۶-۱ محاسبات Chem3D و ویژگی های محاسبات QSAR و QSPR
۱۸	۷-۱ قرار دادن دو مولکول در کنار هم
۲۱	۸-۱ ساختن فایل ورودی گوسین
۲۶	۹-۱ اجرا (RUN) گوسین
فصل دوم: آموزش GaussView و محاسبات گوسین	
۳۱	۱-۲ GaussView
۳۳	۲-۲ تبدیل فایل خروجی گوسین به فایل ورودی گوسین
۳۴	۳-۲ انواع فایل های ورودی
۳۴	۴-۲ دستورات گوسین
۳۴	۱-۴-۲ opt یا fopt
۳۵	۲-۴-۲ Freq
۳۵	۳-۴-۲ روش های تشخیص صحیح بودن جواب های دستور Freq
۴۰	۴-۴-۲ خروجی محاسبات فرکانسی
۴۲	۵-۲ توصیف گرهای موجود در دستور Freq

۴۲	۱-۵-۲ انرژی‌ها
۴۳	۲-۵-۲ آنتالپی و انرژی‌های واکنش
۴۵	۳-۵-۲ جرم مولکولی (Molecular Mass)
۴۵	۴-۵-۲ قطبش‌پذیری (Polarizability)
۴۶	۵-۵-۲ به دست آوردن حالت گذار (TS)
۵۲	۶-۵-۲ انرژی‌های تشخیص صحیح بودن حالت گذار (TS)
۵۵	۶-۶-۲ پتانسیل $\text{prop} = \text{potential}$
۵۵	۷-۲ محاسبه انرژی‌ها و واکنش‌ها
۵۷	۸-۲ دستور NBO
۵۷	۱-۸-۲ توصیف‌گرها
۵۷	۲-۸-۲ دیاگرام لوئیس
۵۸	۳-۸-۲ $E(2)$
۵۸	۹-۲ volume (حجم مولکولی)
۵۹	۱۰-۲ دستور NMR
۶۰	۱۱-۲ مشاهده‌ی اندازه و زوایای مولکول
۶۱	۱۲-۲ روش‌های مجموعه پایه‌ی کامل (Complete Basis Set Methods(CBS))
۶۲	۱-۱۲-۲ انرژی پتانسیل یونیزاسیون (Ionization Potentials)
۶۴	۲-۱۲-۲ انرژی کشش الکترون (Electron affinity)
۶۴	۳-۱۲-۲ انرژی کشش پروتون (Proton affinity)
۶۵	۴-۱۲-۲ انرژی اتمیزاسیون (Atomization)
۶۶	۱۳-۲ scan
۶۶	۱-۱۳-۲ Scan (فاصله)
۶۹	۲-۱۳-۲ Scan یک زاویه‌ی دو وجهی (Dihedral angle)

فصل سوم: آموزش spartan

۱۰۷

۱-۳ نصب نرم‌افزار

۱۱۵

۲-۳ آیکون‌ها

۱۱۶

۲-۳ رسم مولکول

۱۲۵

۱-۳-۳ روش ساده رسم مولکول

۱۲۸

۴-۳ محاسبات

۱۳۰

۱-۴-۳ محاسبات

۱۳۴

۲-۴-۳ مشاهده یات‌های کانسی‌ها

۱۳۶

۳-۴-۳ محاسبه‌ی MR

۱۳۷

۴-۴-۳ مشاهده‌ی طیف NMR

۱۳۹

۵-۴-۳ محاسبات HOMO و LUMO

۱۴۳

۶-۴-۳ مشاهده‌ی سطح مولکول

فصل چهارم: نرم‌افزار AIM

۱۴۷

۱-۴ فایل ورودی AIM

۱۴۸

۲-۴ روش محاسبه‌ی نقاط بحرانی

۱۵۳

۱-۲-۴ ذخیره کردن نتایج محاسبات

۱۵۳

۲-۲-۴ توصیف‌گرها

۱۵۶

۳-۲-۴ محاسبه‌ی اتم‌ها

۱۶۰

۳-۴ رسم کانتور

فصل پنجم: آموزش نرم‌افزار VEDA

۱۶۶

۱-۵ طیف‌سنجی IR

۱۶۸

۱-۱-۵ طیف و اثرات مولکولی

۱۶۹	۲-۵ تفاوت جذب مولکول‌ها در IR و Raman
۱۶۹	۱-۲-۵ تأثیر نوع پیوند
۱۶۹	۲-۲-۵ تأثیر جرم اتم‌ها
۱۷۰	۳-۲-۵ تأثیر هیبریداسیون
۱۷۰	۴-۲-۵ تأثیر نوع حرکت
۱۷۰	۵-۲-۵ تأثیر رزونانس
۱۷۱	۳-۵ انواع پیک در IR
۱۷۱	۴-۵ نمایش تغییراتی در انواع کششی (Stretching) و خمشی (Bending)

فصل ششم: خطاهای محاسبه

۱۸۲	۱-۶ خطای تعداد سیکل
۱۸۳	۲-۶ خطای مربوط به رفتن برق
۱۸۳	۳-۶ خطای مسیر
۱۸۴	۴-۶ خطای انطباق مجموعه پایه BSSE

فصل هفتم: آموزش کاربردی هایپرکم HyperChem

۱۸۷	۱-۷ معرفی هایپرکم
۱۸۷	۲-۷ طریقه‌ی رسم مولکول
۱۹۱	۳-۷ ساخت فایل ورودی گوسین (gjf)

فصل هشتم: گریزی کوتاه به تئوری

۱۹۵	۱-۸ پیوند کووالانسی
۱۹۸	۲-۸ پیوند داتیو
۱۹۸	۳-۸ پیوند هیدروژنی (نوع خاصی از پیوندهای دو قطبی-دوقطبی)
۲۰۰	۱-۳-۸ فواصل و زوایا
۲۰۱	۲-۳-۸ طبقه‌بندی پیوندهای هیدروژنی

- ۳-۳-۸ تفاوت پیوند هیدروژن- هیدروژن و پیوند دو هیدروژنی
- ۳-۴-۸ پیوند یونی (الکترووالانسی)
- ۸-۵ نظریه‌ی اتم‌ها در مولکول‌ها (AIM)
- ۸-۵-۱ فرضیه‌ی اتم
- ۸-۵-۲ تعریف هندسه‌ی فضایی اتم
- ۸-۵-۳ تعریف اتم در نظریه‌ی اتم در مولکول
- ۸-۵-۴ تعریف پیوند
- ۸-۵-۵ تشخیص پیوند با توجه به توصیف‌گرهای AIM
- ۸-۶ تحلیل اوربیتال پیوندی (NBO)
- ۸-۷ خطای انطباق مجسمه‌ی BSS

۲۱۹	ارسال مقاله
۲۳۶	آموزش نصب نرم‌افزار Chem. Office Ultra 2008 1.0 FULL
۲۵۸	آموزش نصب نرم‌افزار Gauss View 5.0
۲۶۵	راهنمای نصب نرم‌افزار HyperChem v.7.0
۲۶۹	جدول مجموعه پايه‌ها
۲۸۲	آشنایی با مؤسسه‌ی اطلاعات علمی و مقالات (ISI)
۲۸۴	آموزش EndNote 7 (نرم‌افزار مدیریت اطلاعات و استنادهای علمی)
۳۰۴	منابع