

کاربرد نرم افزار گوسین در شیمی

نویسنده:

دکتر فاطمه حسین زاده

مدرس دانشگاه فنی حرفه ای

سرشناسه	: حسین زاده، فاطمه، ۱۳۵۱ -
عنوان و نام پدیدآور	: کاربرد نرم افزار گوسین در شیمی/ نویسنده فاطمه حسین زاده.
مشخصات نشر	: تهران: ندای کارآفرین، ۱۳۹۳.
مشخصات ظاهری	: ۲۰۸ص.
شابک	: 978-600-7095-10-2
وضعیت فهرست نویسی	: فیبا
موضوع	: نرم افزار گاوسی
موضوع	: اوربیتالهای مولکولی -- داده پردازی
موضوع	: فرایندهای گاوسی -- برنامه های کامپیوتری
رده ی کنگره	: QD۴۶۲/۶/ج۵ک۲ ۱۳۹۳:
ردیف دیویی	: ۵۴۱/۲۸۰۳۸۵:
شماره کتابخانه	: ۳۴۶۳۴۱۴



نام کتاب	: کاربرد نرم افزار گوسین در شیمی
نویسنده	: فاطمه حسین زاده
تیراژ	: ۱۰۰۰ نسخه
نوبت چاپ	: اول ۱۳۹۳
قیمت	: ۱۰۰۰۰ تومان

مرکز پخش: خیابان انقلاب، خیابان فخررازی، نبش کوچه انوری، پلاک ۲۹
تلفن تماس: ۶۶۴۰۲۷۲۲

۱۹	مقدمه
۲۱	فصل اول - شیمیآلی پالادیم
۲۳	۱-۱ پیشینه تاریخی شیمیآلی پالادیم
۲۴	۲-۱ واکنشهای شامل حدواسطهای آلپالادیم
۲۴	۱-۱-۱ واکنشهای نوع اول
۲۶	۲-۲ واکنشهای نوع دوم:
۲۷	۱-۱-۱-۱ واکنش هک:
۲۸	۳-۲-۱ واکنشهای نوع سوم
۲۹	۱-۳-۲-۱ جفت شدن واکنشگرهای آلی فلزی.
۳۰	۲-۳-۲-۱ جفت شدن با تلع.
۳۱	۳-۳-۲-۱ جفت شدن با بورانها:
۳۱	۴-۳-۲-۱ واکنشهای کربوئیدسیور:
۳۳	۳-۱ افزایش اکسایشی
۳۳	۱-۳-۱ معرفی واکنشهای افزایشی اکسایشی
۳۳	۱-۱-۳-۱ واکنشگرهای غیر الکتروفیلی
۳۴	۲-۱-۳-۱ واکنشگرهای الکتروفیلی
۳۸	۳-۱-۳-۱ واکنشگرهای صدمه ندیده
۴۰	۴-۱ واکنش افزایش اکسایشی در واکنشهای جفت شدن متقاطع
۴۱	۵-۱ افزایش اکسایشی بر روی کمپلکسهای Pd
۴۴	۶-۱ بررسی سینتیک و مکانیسمایزومریزاسیون سیس بهترنس کمپلکس [Pd(C6Cl2F3)I(Ph3)2]
۵۰	۷-۱ افزایش اکسایشی آریلهالیدها به Pd (0)
	۸-۱ مکانیسمایزومریزاسیون سیس بهترنس کمپلکس [Pd(Ph3)2(vinyl)Br]
۵۳	

۵۷	فصل دوم - روشهای محاسباتی
۵۹	۱-۲ مقدمه
۶۱	۲-۲ مکانیک کوانتومی
۶۴	۳-۲ حل معادله شرودینگر الکترونی
۶۶	۴-۲ روشهای مکانیک ملکولی
۶۷	۵-۲ روشهای مکانیک کوانتومی
۶۷	۸-۲ روشهای نیمه تجربی
۶۸	۵-۲ روشهای آغازین
۶۹	۲-۵-۲ پیچیدگی - فاک
۷۱	۵-۲ ۱-۱۰ تریه اختلال مولر-پلست
۷۱	۲-۵-۲ ۱-۲ برپایه پیکربندی (CI)
۷۳	۳-۵-۲ نظریه دامی (DFT)
۸۰	۶-۲ حلال پوشی
۸۰	۶-۲ ۱-۶ اساس فیزیکی اثرات پوشی
۸۱	- روشهای پیوستار
۸۱	- معادله پویسون
۸۲	- میدان واکنش خودسازگار
۸۲	۲-۶-۲ مدل انساگر
۸۳	۳-۶-۲ مدل پیوستار قطبش پذیر (PCM)
۸۶	۷-۲ سطح انرژی پتانسیل (PES)
۸۸	۸-۲ سری پایه
۸۸	۱-۸-۲ طرحهای انقباض
۹۰	۲-۸-۲ نمادگذاری
۹۴	۹-۲ الکترونهاي درونی
۹۵	۱۰-۲ روشهای محاسباتی شیمیایی فلزی

۹۷	فصل سوم- بررسی نظری واکنش ایزومریزاسیون
۹۹	۱-۳ روشهای محاسباتی با استفاده از نرم افزار گوسین
۱۰۰	۱-۱-۳ روش کار با نرمافزار گوسین
۱۰۳	۲-۳ بررسی سینتیک و مکانیسمایزومریزاسیون سیس بهترنس
۱۰۵	۱-۲-۳ مکانیسم حلال کمکی و PH_3 - حساس (مسیر k_3 شکل ۱-۳)
۱۱۳	۱-۱-۱-۳ مرحله k_5 :
۱۲۱	۱-۱-۲-۳ مرحله k_6 (B^{cis} به C^{cis})
۱۲۲	۱-۲-۳ مرحله k_6 (B^{trans} به C^{trans})
۱۲۶	۱-۲-۳ مرحله k_4 (سیس)
۱۲۹	۱-۲-۳ مرحله k_4 (ترنس)
۱۳۳	۲-۲-۳ مکانیسم حلال بدون کمک حلال (مسیر k_4)
	۳-۲-۳ مکانیسم غیر سیس PH_3 (دومسیرپیشنهادی با کمک و بدون کمکحلال)
۱۴۱	۴-۲-۳ مسیر تفکیکی
۱۴۲	۳-۳ سینتیک مکانیسم
۱۴۴	۴-۳ نتایج محاسبات سینتیکی فرایندایزومریزاسیون
۱۵۱	۵-۳ اثرات حلال
۱۵۱	۱-۵-۳ اثر حلال DMF بر روی مسیر k_3 در فاز محلول (برفازگازی)
۱۵۵	۱-۱-۵-۳ مقایسه اثر حلال DMF بر روی مسیر k_3 در فاز محلول: ۱۵۵
۱۵۸	۲-۱-۵-۳ اثر حلال بر روی مسیر k_4
۱۵۸	۳-۱-۵-۳ اثر حلال DMF بر روی مسیر k_4 :
۱۶۱	۴-۱-۵-۳ مسیر k_4 در فاز گازی و مقایسه آن با فاز محلول:
۱۶۱	۲-۵-۳ حلال کلروبنزن ($PhCl$)
۱۶۶	۱-۲-۵-۳ اثر $PhCl$ بر روی مسیر k_3 در فاز محلول:
۱۶۷	۲-۲-۵-۳ مقایسه اثر حلال کلروبنزن بر روی مسیر k_3 در فاز گازی با فاز محلول:
۱۶۸	۳-۲-۵-۳ اثر $PhCl$ بر روی مسیر k_4
۱۶۹	۳-۵-۳ اثر استون (Ac) بر روی مسیر k_3 در فاز محلول:
۱۷۴	۱-۳-۵-۳ مقایسه اثر حلال استون بر روی مسیر k_3 در فاز گازی با فاز محلول:

- ۱۷۴ ۲-۳-۵-۳ اثر استون بر مسیر k_4
- ۱۷۵ ۴-۵-۳ اثر THF بر مسیر k_3 .
- ۱۸۰ ۱-۴-۵-۳ مقایسه اثر حلال THF بر روی مسیر k_3 در فاز گازی با فاز محلول:
- ۱۸۱ ۲-۴-۵-۳ اثر THF بر مسیر k_4
- ۱۸۲ ۵-۵-۳ اثر MeCN بر مسیر k_3
- ۱۸۶ ۱-۵-۵-۳ اثر حلال MeCN بر روی مسیر k_3 در فاز گازی:
- ۱۸۷ ۲-۵-۸-۳ اثر MeCN بر مسیر k_4
- ۱۸۸ ۶-۵-۳ اثرات حلال و مقایسه آن با فاز گازی
- ۱۹۳ ۷-۵-۳ مقایسه فاز محلول در مسیر k_4
- ۱۹۵ مراجع