

شیمی محاسباتی :

اصول کلی، روش‌ها و نرم افزارها

حسین شیرانی ایل بیگی

فرهاد غلام پرر

نشر کاروان برآمدگان

۱۳۹۶

سرشناسه : شیرانی ایل بیگی، حسین، ۱۳۶۱ -
 عنوان و نام پدیدآور : شیمی محاسباتی: اصول کلی، روش‌ها و نرم‌افزارها/ حسین شیرانی ایل بیگی، فرهاد غلام‌پور.
 مشخصات نشر : تهران: کاروان ایرانگردان، ۱۳۹۶.
 مشخصات ظاهری : ۱۸۳ ص: مصور (بخشی رنگی)، جدول (بخشی رنگی)، نمودار (بخشی رنگی).
 شابک : ۹۷۸-۶۰۰-۹۷۲۸۶-۴-۰

وضعیت فهرست نویسی : فیپا
 یادداشت : ص.ع. به انگلیسی: Hossein Shirani Il Beigi, Farhad Gholampour. Computational chemistry; general principles, methods and softwares
 یادداشت : کتابنامه.

موضوع : شیمی -- داده‌پردازی - Chemistry -- Data processing
 موضوع : شیمی -- نرم‌افزار - Chemistry -- Software
 موضوع : ساختار مولکولی -- نرم‌افزار - Molecular structure -- Software
 موضوع : اوربیتال‌های مولکولی -- داده‌پردازی
 موضوع : Molecular orbitals -- Data processing
 شناسه افزوده : فلاپور، فرهاد، ۱۳۶۰ -
 رده بندی کنگره : QD ۳۰۰/۹۰۲۹۶
 رده بندی دیویی : ۵۴۲/۸۵
 شماره کتابشناسی ملی : ۵۰۳۹۰۳۷

نام کتاب : شیمی محاسباتی: اصول کلی، روش‌ها و نرم‌افزارها
 مولفین : حسین شیرانی ایل بیگی - فرهاد غلام‌پور
 طرح جلد : شبنم عزیزپور
 چاپ : اول - ۱۳۹۶
 شابک : ۹۷۸-۶۰۰-۹۷۲۸۶-۴-۰
 قیمت : ۳۰۰۰۰ تومان

فهرست مطالب

۵	مقدمه مولفین
۷	فصل اول: نگاه کلی بر شیمی محاسباتی
۷	۱-۱- شیمی محاسباتی
۹	۱-۲- مطالعه‌ی آن که با روش‌های شیمی محاسباتی می‌توان به آنها پرداخت
۱۱	۱-۳- ابزار کار روش‌های مکانیک مولکولی
۱۶	۱-۴- محدودیت‌های روش محاسبات مکانیک مولکولی
۱۶	۱-۵- مکانیک کوانتومی
۱۸	۱-۶- انواع روش‌های Semiempirical
۲۰	۱-۷- اصول کاربردی روش‌های مکانیک کوانتومی آغازین
۲۱	۱-۸- محدودیت‌ها، نقاط قوت و اعتبار روش آغازین
۲۲	۱-۹- اجرای یک محاسبه به روش آغازین
۲۳	۱-۱۰- واحدها
۲۵	۱-۱۱- مبانی سیستم عامل یونیکس / لینوکس
۲۷	فصل دوم: نحوه انجام محاسبات
۲۷	۲-۱- نحوه‌ی ساختن یک فایل ورودی جهت انجام محاسبات
۳۳	۲-۲- جزئیات نحوه‌ی ساختن یک فایل ورودی گوسین
۳۴	۲-۳- قسمت‌های مختلف یک فایل ورودی
۳۵	۲-۴- واحدها
۳۶	۲-۵- برخی از کلیدواژه‌ها
۳۷	۲-۶- سیستم مختصات
۳۸	۲-۷- مختصات نرمال
۳۹	۲-۸- مختصات درونی؛ فقط کششی
۴۰	۲-۹- مختصات داخلی؛ یک فاصله به اضافی زاویه‌ها
۴۰	۲-۱۰- مختصات داخلی؛ فاصله‌ها و زاویه‌ها
۴۱	۲-۱۱- محور جسم ثابت

۴۳	فصل سوم: نرم افزار Gabedit
۴۳	۳-۱ ساخت مولکول با نرم افزار Gabedit
۴۹	۳-۲ چرا عملکرد با خطا مواجه می شود و چگونه آن را حل کنیم؟
۵۲	۳-۳ خروجی محاسبه نقطه مشترک انرژی
۵۵	۳-۴ انرژی در Gabedit
۵۷	۳-۵ سطوح انرژی اوربیتال های مولکولی در Gabedit
۵۸	۳-۶ ضرایب اوربیتال مولکولی
۵۹	۳-۷ توزیع بار الکتریکی در Gabedit
۶۰	۳-۸ گشتاور دو قطبی و چند قطبی در Gabedit
۶۱	۳-۹ زمان دزم CPU و دیگر منابع مورد استفاده
۶۱	۳-۱۰ مشاهده اوربیتال ها در Gabedit
۶۵	فصل چهارم: سطح انرژی پتانسیل
۶۵	۴-۱ سطح انرژی پتانسیل
۶۸	۴-۲ موقعیت حداقلی
۷۲	۴-۳ مقایسه شیب تحلیلی با شیب عددی Hessians
۷۴	۴-۴ بهینه سازی هندسی گاوسی
۸۱	فصل پنجم: بهینه سازی در Gabedit
۸۲	۵-۱ کارهای چند مرحله ای (ترکیبی)
۸۵	۵-۲ اصلاح بهینه سازی هندسه
۸۷	۵-۳ بهینه سازی محدود Constrained optimizations
۹۱	۵-۴ معیارهای همگرایی
۹۳	۵-۵ موارد بهینه سازی سخت
۹۴	۵-۵-۱ محاسبه ثابت های نیرو (فرکانس)
۹۵	۵-۵-۲ افزایش تعداد مراحل و راه اندازی مجدد
۹۵	۵-۵-۳ شروع از یک ساختار اولیه بهتر
۹۷	۵-۵-۴ استفاده از سطوح پایین تر تئوری در بهینه سازی ساختار
۱۰۱	فصل ششم: محاسبات فرکانس
۱۰۱	۶-۱ مقدمه

۱۰۲	۶-۲ - تحلیل ارتعاشی
۱۰۷	۶-۳ - حرکت ارتعاشی
۱۰۸	۶-۴ - مجموعه‌ی پایه در برابر روش‌های شبکه‌ای
۱۱۰	۶-۵ - قطری سازی
۱۱۰	۶-۶ - حرکت چرخشی
۱۱۳	۶-۷ - شدت انتقال
۱۱۳	۶-۸ - چرخش-ارتعاش
۱۱۵	۶-۹ - محاسبه درکنش‌های ارتعاشی در گوسین
۱۱۶	۶-۱۰ - شدت درکنش‌های ارتعاشی
۱۱۷	۶-۱۱ - شیوه‌های ارتعاشی
۱۱۸	۶-۱۲ - رسم طیف، Gahed
۱۲۱	فصل هفتم: شیمی گرمایی
۱۲۱	۷-۱ - تابع تقسیم مولکولی و کمتهای ترمودینامیکی
۱۲۳	۷-۲ - فرضیه گاز ایده‌آل
۱۲۵	۷-۳ - تابع تقسیم الکترونی مولکولی
۱۲۵	۷-۴ - تابع تقسیم انتقالی مولکولی
۱۲۶	۷-۵ - تابع تقسیم چرخشی مولکولی
۱۲۷	۷-۶ - تابع تقسیم ارتعاش مولکولی
۱۲۸	۷-۷ - ترموشیمی در گوسین
۱۳۱	فصل هشتم: عوامل مقیاس‌بندی
۱۳۳	۸-۱ - تغییر پارامترهای ترمودینامیکی
۱۴۱	فصل نهم: کاوش بر روی سطح انرژی پتانسیل
۱۴۲	۹-۱ - بهینه کردن ساختار انتقالی
۱۴۴	۹-۲ - شناسایی نقاط ساکن در روی PES
۱۵۲	۹-۳ - مسیر ذاتی واکنش IRC
۱۵۸	۹-۴ - محاسبه‌ی انرژی اکتیواسیون واکنش و ثابت سرعت واکنش
۱۵۹	۹-۵ - اسکن سطح پتانسیل (Potential surface scan)
۱۵۹	۹-۵-۱ - بررسی سطح انرژی پتانسیل سخت

۱۶۲.....	۹-۵-۲- بررسی سطح انرژی پتانسیل آرامشی
۱۶۷.....	فصل دهم: گذری بر روش های CIS و NICS و NBO
۱۶۷.....	۱-۱۰- محاسبات اوربیتال های پیوندی طبیعی
۱۷۱.....	۲-۱۰- آشنایی با اصطلاحات فایل خروجی NBO
۱۷۲.....	۳-۱۰- مفهوم آروماتیسیته در شیمی
۱۷۳.....	۴-۱۰- جابه جایی شیمیایی هسته های مستقل
۱۷۴.....	۵-۱۰- اصول روش NICS
۱۷۶.....	۶-۱۰- روش CIS
۱۷۷.....	۷-۱۰- روش CASCF
۱۷۹.....	References

مقدمه مولفین

روش‌های مکانیک مولکولی بر اساس قوانین فیزیک کلاسیک می‌باشند. در آن‌ها به صراحت برای الکترون‌ها از اثرات الکترونیکی مانند پیوندهای شیمیایی که به طور ضمنی در تابع انرژی شناخته شده و به عنوان میدان نیرو گنجانده شده‌اند و فعل و انفعالات بین هسته را توصیف می‌کنند استفاده شده است. روش مکانیک مولکولی توسط میدان‌های نیرو، که نیایی از آنها پارامتر شده است مشخص می‌شود.

استفاده از روش‌های مکانیک مولکولی محاسباتی بهره‌وری بسیار بالاتر دارد، که اجازه مدل‌سازی سیستم‌های بسیار بزرگ با برخی از اتم‌ها، شبیه‌سازی از گروه‌های مولکولی و غیره را می‌دهد. از جمله پیش‌بینی‌هایی که این روش‌های محاسباتی برای مولکول‌ها و واکنش‌های شیمیایی مربوط ارائه می‌دهند، می‌توان به واکنش‌پذیری مولکول‌ها، گشتاورهای دوقطبی-پنج‌قطبی، قطب‌پذیری، انرژی‌های برهم‌کنش، اثرات استخلافی، توزیع بار در مولکول‌ها، انرژی رانش، انرژی الکترون خواهی، گرمای تشکیل واکنش، انرژی فعال‌سازی، پارامترهای ترمودینامیک، ترازهای انرژی‌های مولکولی، مسیرهای سینتیکی واکنش‌ها، ارائه سازوکار واکنش، فرکانس‌های ارتعاشی و ... اشاره نمود. برای مثال دانستن این‌که الکترون‌ها کجا متمرکز شده‌اند (مکان‌های هسته‌دوست) و یا این‌که الکترون‌ها کجا می‌خواهند بروند (مکان‌های الکترون‌دوست) را قادر می‌سازد تا پیش‌بینی کنیم چه نوع واکنش‌هایی می‌توانند برای مولکول مورد نظر طراحی و در نظر گرفته شوند. در کل یافتن ارتباط ویژه‌ای بین ساختارهای شیمیایی و خواص شیمیایی مواد از بزرگترین دستاوردهای این علم نظری می‌باشد.

اساس محاسبات مکانیک کوانتومی نظریه اوربیتال مولکولی می‌باشد که از تقریب اوربیتال مولکولی هارتری فاک استفاده می‌شود. از میان روش‌های مکانیک کوانتومی می‌توان به معادله موجی شرودینگر، نمایش برداری دیراک، جوردان و محاسبات

ماتریسی هایزنبرگ و بورن اشاره کرد. از میان روش‌های مذکور، نمایش برداری دیراک روش گسترش‌یافته‌تری در مقایسه با روش‌های دیگر است. معادله موجی شرودینگر از میان روش‌های فوق، شناخته شده‌تر می‌باشد. به همین دلیل در اکثر مسایل شیمیایی با حدس هامیلتونی واقعی و تابع موج واقعی معادله شرودینگر حل می‌شود.

$$H\psi = E\psi$$

با پیشرفت این علم آمیدی در دل شیمیدانان زنده می‌شود، که دیگر مجبور نخواهند بود نظاره‌گر آن باشند که واکنش شیمیایی چه محصولی برای او تولید می‌کند، بلکه می‌توانند با کمک دینامیک مولکولی، واکنش را به سوی تولید محصول دلخواه سوق دهند.

حسین شیرانی ایل‌بیگی

فرهاد غلام‌پور