

3856

۵۰۰

۱

۲۹۳

حسین



شبیه سازی مولکول های آلی با استفاده از

نرم افزار DS ViewerPro

تالیف:

دکتر عباس رجبی ابهری

دکتر زهرا محمودی

سرشناسه	: رجبی ابهری، عباس، ۱۳۶۶ -
عنوان و نام پدیدآور	: آموزش شبیه سازی مولکول های آلی با استفاده از نرم افزار Ds Viewerpro / مولفین عباس رجبی ابهری، زهرا محمودی.
مشخصات نشر	: قم: آثار نفیس، ۱۳۹۸.
مشخصات ظاهری	: ۳۹۳ص.: مصور، جدول، نمودار + ۱ عدد لوح فشرده.
شابک	: ۸۰۰۰۰۰ ریال: با لوح فشرده 9-56-7964-600-978:
وضعیت فهرست نویسی	: فیبا
موضوع	: مولکول ها -- الگوها -- شبیه سازی کامپیوتری
موضوع	: Molecules -- Models -- Computer simulation
موضوع	: ساختار مولکول -- شبیه سازی کامپیوتری
موضوع	: Molecular structure -- Computer simulation
موضوع	: مولکول ها -- الگوها -- نرم افزار
موضوع	: Molecules -- Models -- Software
موضوع	: ساختار مولکول -- نرم افزار
موضوع	: Molecular structure -- Software
شناسه افزوده	: محمودی، زهرا
رده بندی کنگره	: QD۴۸۰
رده بندی دیویی	: ۳۳۰/۱۳۲/۵۴۱
شماره کتابشناسی ملی	: ۵۸۳۵۶۱۰

نام کتاب: آموزش شبیه سازی مولکول های آلی با استفاده از نرم افزار Ds Viewerpro
تالیف: دکتر عباس رجبی ابهری، دکتر زهرا محمودی



ISBN- 978-600-7964-56-9

چاپ اول: ۱۳۹۸

ناشر: انتشارات آثار نفیس

شابک:

تیراژ: ۵۰۰ جلد

قیمت: ۸۰۰۰۰۰ ریال

کلیه حقوق برای مؤلف / ناشر محفوظ می باشد.

▪ قم - انتشارات آثار نفیس

▪ انتشارات: ۰۲۵۳۳۲۸۰۴۶۳۴

مدیر مسئول: ۰۹۱۲۵۵۲۴۰۰۷

فروشگاه اینترنتی: www.Shopnafis114.com - www.Shopnafis114.ir

فهرست مطالب صفحه

فصل اول

شیمی آلی ۱

طبقه بندی ترکیبات آلی ۳

انواع پیوند در ساختارهای هیدروکربنی ۹

انواع کربن ۱۱

اصول نامگذاری ترکیبات آلی ۱۶

آلکان‌ها ۱۷

اسکلت کربنی ۱۸

مروری بر استخلاف‌ها یا شاخه‌های فرعی متداول متصل به زنجیره اصلی هیدروکربنی ---

۲۰

گروه‌های آلکیلی (R) ۲۰

هالوژن‌ها (X) ۲۲

فنیل (Ph) ۲۴

استخلاف‌های دارای هترو اتم‌های اکسیژن و نیتروژن ۲۴

قواعد نامگذاری ترکیبات هیدروکربنی ۲۶

دو نامگذاری خاص در آلکان‌ها ۳۶

آلکن‌ها ۳۹

- قواعد نامگذاری در آلکن‌ها ۳۹
- شیمی فضایی یا استرنو شیمی ۴۲
- آلکین‌ها ۴۵
- سیکلو آلکان‌ها ۴۸
- ایزومر یا همپار ۵۰
- بررسی شیمی فضایی دو ساختار معروف در طبقه سیکلو آلکان‌ها ۵۳
- سیکلو آلکن‌ها ۵۶
- سیکلو آلکین‌ها ۵۸
- بی سیکلوها ۵۸
- نامگذاری بی سیکلرها ۵۸
- آروماتیک‌ها ۶۳
- اولویت در نامگذاری در صورت وجود استخلافهای گوناگون ۶۸
- نامگذاری ترکیبات آلی دارای گروه عاملی ۷۰
- کربوکسیلیک اسیدها ۷۰
- الکل‌ها ۷۲
- اترها ۷۱
- استرها ۷۵
- آلدهیدها ۷۶

کتون‌ها ----- ۷۷

آمیدها ----- ۷۸

آمین‌ها ----- ۷۹

اسید آمینه‌ها ----- ۸۴

فصل دوم

آشنایی با محیط نرم افزار DS ViewerPro ----- ۸۸

تمرین ۱ - رسم ساختارهای دارای پیوندهای سیگما با استفاده از دستور Insert string -

----- ۱۲۷

تمرین ۲ - رسم ساختارهای دارای پیوندهای پی یا پای با استفاده از دستور Insert

string ----- ۱۳۶

تمرین ۳ - رسم ساختارهای شاخه دار با استفاده از دستور Insert string ----- ۱۴۵

تمرین ۴ - رسم ساختارهای دارای چندین گروه عاملی ----- ۱۵۴

تمرین ۵ - تعیین تعداد اتم‌ها، فرمول مولکولی، درصد اتم‌های موجود، جرم مولکولی،

وزن و حجم مولکول ----- ۱۶۰

تمرین ۶ - نمایش گرافیکی ساختارهای رسم شده به صورت‌های خطی، میله ای، گوی و

میله ای، مدل فضا پرکن و چند وجهی ----- ۱۶۶

تمرین ۷ - رسم ساختار، چرخاندن انیمیشنی و جابجایی آن در صفحه ----- ۱۷۱

تمرین ۸ - رسم ساختار و نمایش آن به صورت تمام صفحه ----- ۱۷۲

تمرین ۹ - نمایش بخش خاصی از ساختار رسم شده ----- ۱۷۴

- تمرین ۱۰ - رسم ساختار و نمایش اتم‌ها تا شعاع دلخواه بر حسب آنگستروم-----۱۷۷
- تمرین ۱۱ - نمایش تبدیل ساختار کتونی به انولی-----۱۸۷
- تمرین ۱۲ - رسم ساختارهای دلخواه به صورت دستی-----۱۹۲
- تمرین ۱۳ - رسم ساختارهای دلخواه به صورت دستی و بکارگیری ابزار Builder tools -----۲۰۱
- تمرین ۱۴ - تعیین آروماتیک بودن یا نبودن ساختارهای رسم شده-----۲۱۰
- تمرین ۱۵ - تعیین بخش‌های دهنده (Donor) و پذیرنده (Acceptor) پیوند هیدروژنی در ساختارهای رسم شده-----۲۱۴
- تمرین ۱۶ - نمایش الیمیشنی ساختارهای رسم شده-----۲۱۸
- تمرین ۱۷ - رسم ساختار تعیین تعداد اتم‌ها، فرمول مولکولی بسته، درصد عناصر تشکیل دهنده، جرم مولکولی، حجم مولکول، تعداد پیوندهای هیدروژنی دهنده و پذیرنده مجموع بار الکتریکی-----۲۲۵
- تمرین ۱۸ - تعیین مرکز کایرال در ساختار رسم شده-----۲۳۴
- تمرین ۱۹ - رسم ساختار شیمیایی با گروه نقطه ای دلخواه و رسم ساختمان بلوری-----۲۶۷
- تمرین ۲۰ - رسم ساختارهای دارای بارهای الکتریکی-----۲۷۳
- تمرین ۲۱ - تعیین هیبریداسیون-----۲۷۶

سخن مولفین:

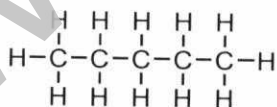
یکی از راه‌های آشنایی با ساختار انواع مولکول در علم شیمی و مشاهده چگونگی قرار گرفتن اتم‌ها در کنار یکدیگر در یک مولکول خاص، مدل سازی آن‌ها است. یکی از مواردی که سبب شده است ساختارهای شیمیایی مولکول‌های مختلف توسط دانشجویان رشته‌های شیمی، مهندسی شیمی و علوم وابسته به آن همانند رشته بیوشیمی پس از مدتی به دست فراموشی سپرده شوند، رسم و یا مشاهده این ساختارها بر روی کاغذ و حفظ کردن آن‌هاست! مواجهه این چنینی با ساختارهای شیمیایی سبب خشک و سخت جلوه دادن فراگیری آن‌ها در ذهن مخاطبین و دانشجویان رشته‌های مربوطه شده است. به طور مثال در اغلب کتب گوناگون شیمی به جهت سادگی رسم، ساختارهای الی معمولاً به سه صورت بسته، نیمه گسترده (نیمه باز) و گسترده (باز) همانند آنچه در زیر آورده شده است، نشان داده می‌شوند:



ساختار بسته :



ساختار نیمه گسترده یا نیمه باز:



ساختار گسترده یا باز :

با اینکه در هنگام آموزش، مطالعه برهمکنش‌ها و نوشتن واکنش‌های شیمیایی، نگارش چنین ساختارهایی سریع و آسان تر است؛ اما در واقعیت و در فضای سه بعدی، مولکول

همانند هیچ یک از ساختارهای فوق در فضا جهت گیری نمی‌کند. ساختارهای مذکور به هیچ وجه مسطح نیستند و زاویه بین مولکولی در ساختارهای شیمیایی آن‌ها آنچنان که در ساختارهای گسترده مشاهده می‌شود، ۹۰ درجه نبوده بلکه ۱۰۹,۵ درجه هستند.

با مدل سازی یا شبیه سازی مولکول‌ها و نظاره کردن آن از زوایای مختلف در فضای سه بعدی می‌توان به تثبیت هر چه بیشتر ساختار آن‌ها در ذهن کمک شایانی نمود.

در گذشته به منظور آشنایی، آموزش، مطالعه و تهیه مدل‌های سه بعدی مربوط به یک مولکول از مدل‌های گوی و میله که اغلب از جنس پلاستیک بوده و در اندازه‌ها و رنگ‌های مختلف ساخته می‌شدند، استفاده می‌شد؛ که البته بکارگیری و استفاده از آن‌ها دارای دشواری‌هایی نیز بود. از جمله مشکلات استفاده از این روش قدیمی این است که نیاز به قطعات زیاد و صرف زمان بسیاری برای مدل سازی درشت مولکول‌ها دارد.

خوشبختانه امروزه با پیشرفت‌های چشمگیر در گسترش و توسعه نرم افزارهای علمی بخصوص نرم افزارهای تخصصی مرتبط با علم شیمی می‌توان علاوه بر فراگیری و آموزش این علم در فضاهای آکادمیک، دانش در این حوزه را بوسیله فعالیت در فضای نرم افزاری و مجازی نیز افزایش داد.

بوسیله نرم افزارهای گوناگون می‌توان به تعداد نامحدود، مولکول‌های شیمیایی را مدل سازی و ساختار آن را در فضا به همراه چرخش ۳۶۰ درجه‌ای و از هر زاویه دلخواه با سرعتی بسیار بیشتر از مدل سازی بوسیله روش قدیمی گوی و میله مشاهده نمود. علاوه بر این با توجه به امکانات نرم افزار انتخاب شده برای استفاده در این راستا می‌توان از دیگر ابزارهای موجود در آن مثلاً تعیین تقارن مولکولی و گروه نقطه‌ای مرتبط با آن، نامگذاری ترکیبات ساده و پیچیده بر اساس قوانین آیوپاک، تعیین زوایای پیوندی، محاسبه طول پیوند، پیش بینی و مشاهده طیف‌های CNMR و HNMR مولکول مدل سازی شده و بررسی اثرات استخلاف‌های مختلف بر روی شیف شدن پیک‌ها در هر یک از طیف‌های مذکور و مواردی بسیار از این دست برای مطالعه هر چه بیشتر ساختارهای مولکولی شیمیایی استفاده نمود.

نرم افزار DS ViewerPro از جمله نرم افزارهای مدل ساز یا به تعبیری بهتر شبیه ساز مولکولی است که به کمک آن می توان انواع نامحدودی از مولکول های ساده و پیچیده آلی و معدنی را رسم و آن را از جهات مختلف با قابلیت چرخش ۳۶۰ درجه ای در فضا مشاهده نمود. این نرم افزار قابلیت فوق العاده ای جهت مطالعه ساختارهای شیمیایی مولکول های متفاوت دارد. به طور کلی هدف از فراگیری این نرم افزار را می توان تحت عناوین ذکر شده در زیر بیان نمود:

- شبیه سازی و مشاهده ساختار شیمیایی مولکول های آلی و معدنی در فضاهای دو و سه بعدی به صورت نامحدود و با فرمت های دلخواه گرافیکی
- تعیین مرکز کایرال در مولکول های آلی (تعیین کربن کایرال)
- تعیین استرئو شیمی مولکول های آلی (R And S)
- تعیین ایزومرهای نوری یا نهمین مولکول مورد بررسی
- آشنایی با برخی ساختارهای تقارنی مهم به همراه گروه نقطه ای آن ها
- مشاهده پیوندهای هیدروژنی بین مولکول های ترکیبات گوناگون
- مشاهده برهمکنش ها یا ممانعت های فضایی درون مولکولی (interaction) و بین مولکولی و محاسبه تغییرات انرژی آن
- نمایش تبدیل ساختارهای شیمیایی مولکول های آلی به همدیگر (کتون - انول)
- تعیین زوایای پیچشی درون مولکولی (بین چهار اتم)
- تعیین زوایای درون مولکولی (بین سه اتم)
- محاسبه طول پیوند در ساختارهای متفاوت (بین دو اتم)
- تعیین درصد عناصر در ساختار
- تعیین جرم مولکولی
- تعیین حجم مولکولی
- تعیین فرمول بسته ساختار
- رسم ابر الکترونی و سطح مولکولی
- تعیین هیبریداسیون های پیوندی sp^3 , sp^2 , sp (کربن-کربن یا کربن - عناصر

(دیگر)

در کتاب پیش رو به منظور ترویج آموزش نوین در علم شیمی و دیگر علوم وابسته به آن، آموزش نرم افزار DS ViewerPro در راستای تحقق اهداف مذکور و مطالعه اصولی و پایه ای ساختارهای شیمیایی به همراه اشاره به برخی مباحث پایه ای و تئوری مرتبط با شیمی آلی در قالب پرسش و پاسخ های کوتاه نگارش شده است. همچنین برای تسلط بر روی کار با نرم افزار پس از آموزش هر بخش تمرین هایی مرتبط در نظر گرفته شده است که با انجام آن ها مخاطب می تواند مهارت خود را در فراگیری نرم افزار و مفاهیم بنیادی و پایه ای تقویت کند.

امید که مطالعه مجموعه آماده شده توانسته باشد گامی هرچند ناچیز در جهت تحقق آموزش نوین برداشته باشد.

با آرزوی موفقیت

برای تمامی جویندگان علم در کشور عزیزمان ایران

دکتر عباس رجبی ابهری

دکتر زهرا محمودی