



معاونت پژوهش، برنامه‌ریزی و توسعه منابع



اداره کل آموزش و پرورش خراسان شمالی

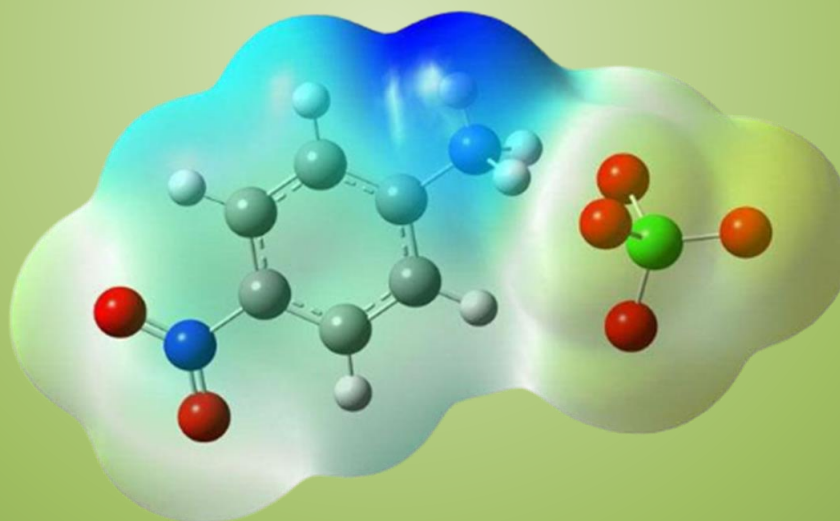
معاونت آموزش متوسطه

اداره تکنولوژی، گروه‌های آموزشی و بررسی محتوا



اداره استعدادهای درخشان و دانش‌پژوهان جوان

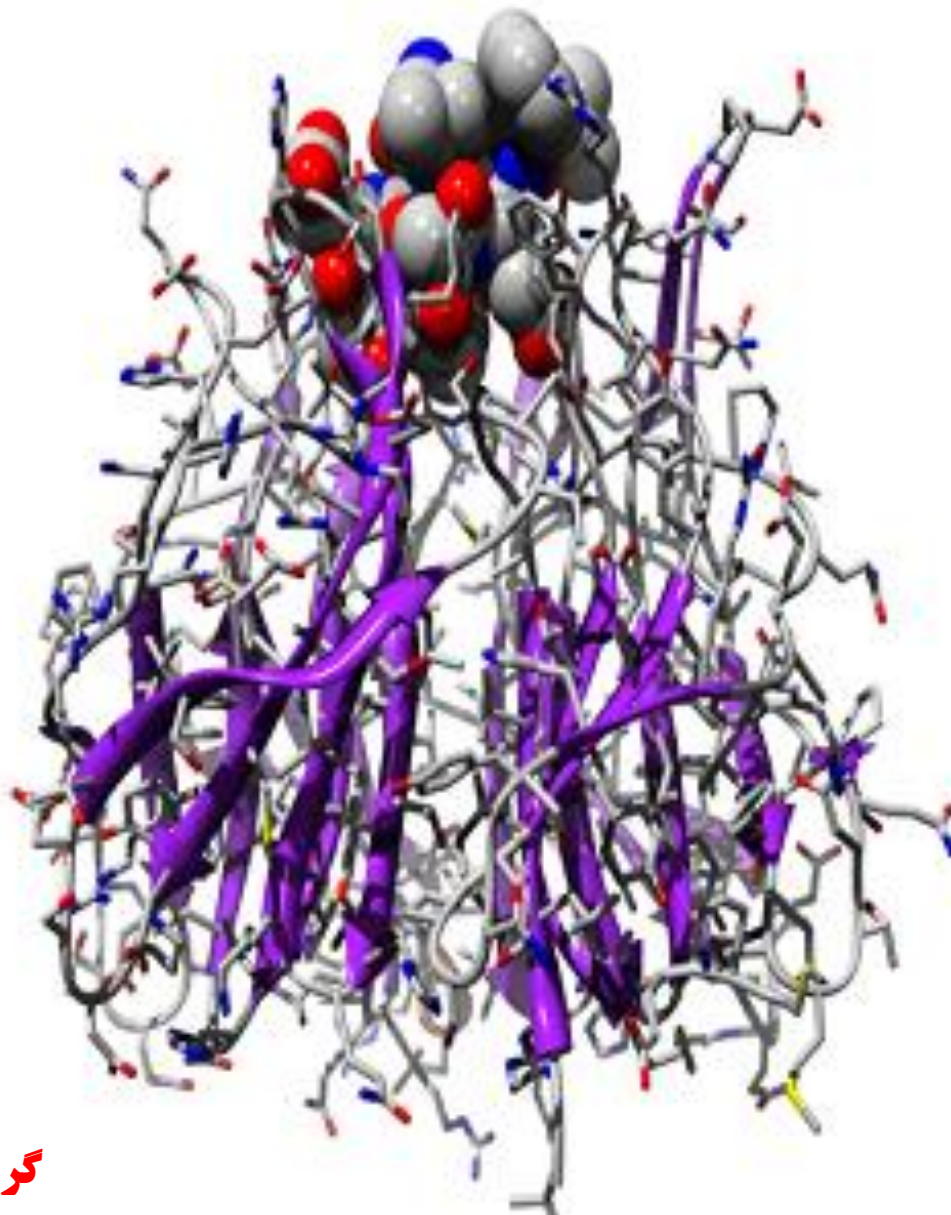
کارگاه رسم نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی



تهیه کننده: بهزاد پدیداران مقدم



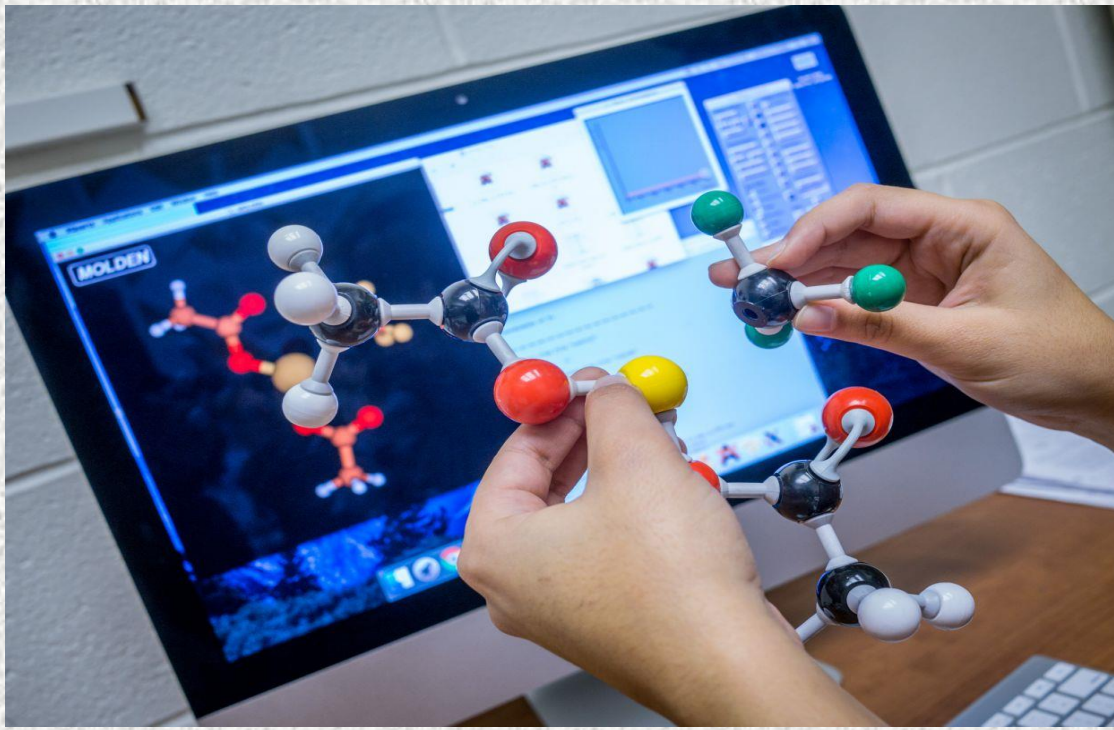
شیمی محاسباتی



گروه شیمی خراسان شمالی

شیمی محاسباتی عبارت است از مجموعه ی تکنیک هایی که برای حل و بررسی مسائل شیمی بر روی کامپیوتر مورد استفاده قرار می گیرد در واقع شیمی محاسباتی شاخه ای از شیمی است که از نتایج بدست آمده از نرم افزار های کامپیوتری برای تعیین هندسه مولکول و همچنین ویژگی های آن استفاده می شود و با کمک این نرم افزار ها می توان به اطلاعات با ارزشی از مولکول دست پیدا کرد که میزان مطابقت اطلاعات بدست آمده از این نرم افزار ها با داده های تجربی بستگی به عوامل

مختلفی دارد



انواع روش های شیمی محاسباتی

➤ روش مکانیک مولکولی:

از قوانین فیزیک کلاسیک تبعیت می کند و برهمکنش بین هسته ها را مورد بررسی قرار می دهد و برای بررسی اثرات الکترونی از میدان های نیرو استفاده می کند.

➤ روش ساختار الکترونی:

قوانین مکانیک کوانتومی را به کار می گیرد و خواص سیستم با حل معادله شرودینگر به دست می آید که به سه دسته روش های نیمه تجربی، روش های آغازین و روش های تابع چگالی الکترونی تقسیم می شود.



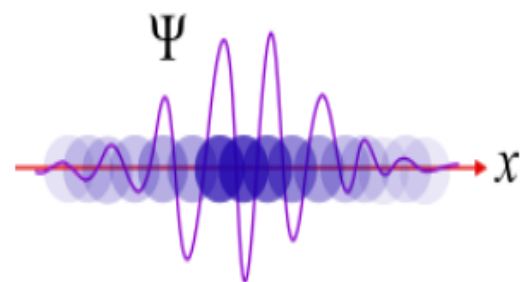
معادله شرودینگر

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

- \hat{H} is the Hamiltonian operator.
- Ψ is the wave function.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{z_{\alpha} z_{\beta} e'^2}{r_{\alpha\beta}} - \sum_{\alpha} \sum_i \frac{z_{\alpha} e'^2}{r_{i\alpha}} + \sum_{i=1} \sum_{i>j} \frac{e'^2}{r_{ij}}$$

- Hydrogenic atoms: H, He⁺, Li²⁺, Be³⁺, ...
- *s*, *p*, *d*, *f*, etc. atomic orbitals (AO's).
- The better the basis set the closer to Ψ & E .

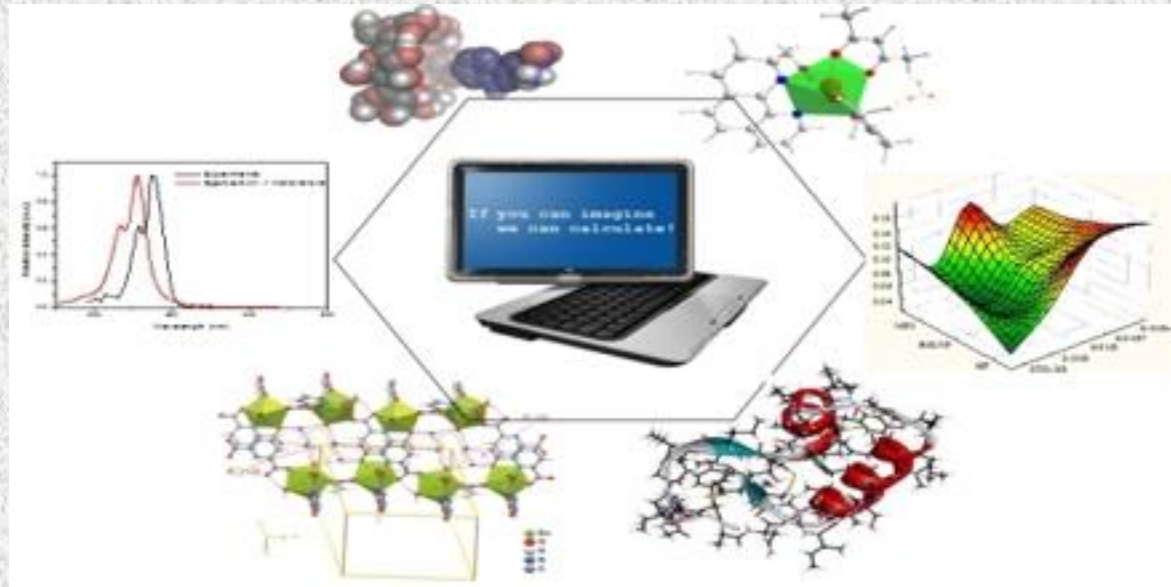


ثابت معادله، انرژی است.

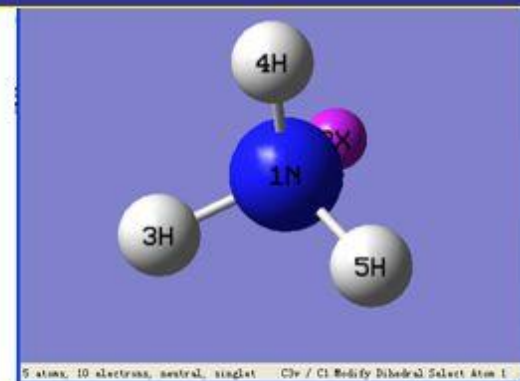
$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r})$$



روش محاسبات کوانتومی به ما کمک می کند تا مجموعه پایدارترین ساختار را با مینیمم کردن تابع انرژی پتانسیل بدست آوریم. در یک ساختار هندسی بهینه شده تمام پارامترهای هندسی مولول در دسترس است. لذا با داشتن مختصات اتمها در چنین ساختاری می توان با استفاده از روش های محاسبات کوانتومی مناسب، دانسیته الکترونی سیستم (در روش (DFT یا تابع موج الکترونی سیستم (در روش هارتری فوک) را پیش بینی نموده و سپس اطلاعات متعددی نظیر پارامترهای IR، NMR، انرژی و... را بدست آورد. در نهایت می توان از مقایسه نتایج محاسبه شده با نتایج تجربی مناسبترین ساختار را برگزید.



Dependence of Computational Accuracy and Time on Computational Methods



Computational conditions

Basis sets: 6-31++G**

Computer: Pentium (R) Dual-Core E5400/2GB/500GB SATA

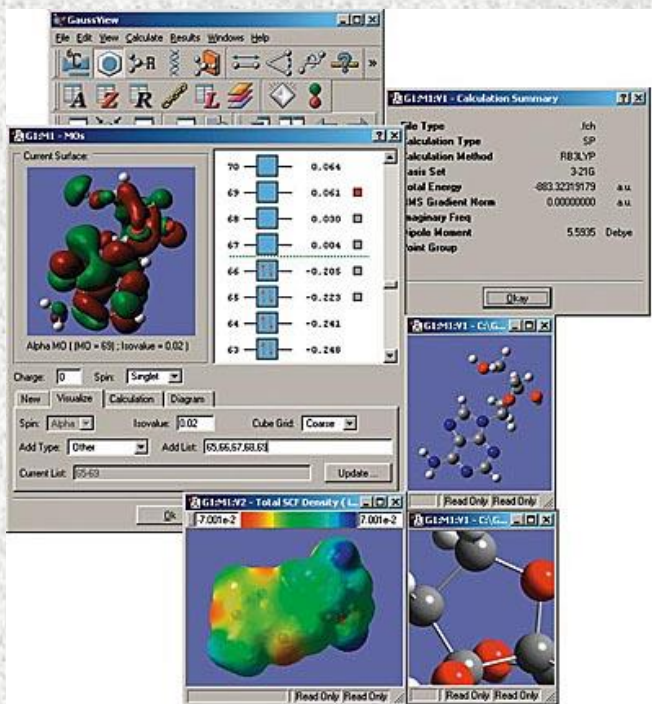
Calculated NH₃ Structure

Methods	HF	MP2	B3LYP	Exptl
$d_{\text{NH}}/\text{\AA}$	1.000	1.012	1.016	1.017
$\angle_{\text{HNH}}/^\circ$	108.8	107.9	108.1	107.5
Time/s	5.0	9.0	6.0	

From the viewpoints of computational accuracy and efficiency, the DFT method (B3LYP) is better than the HF and MP2 methods

نرم افزار Gaussian— GaussView

گوسین (Gaussian) از قدرتمندترین نرم افزارهای محاسباتی حال حاضر است که با ورژن های مختلفی در دسترس قرار دارد. این نرم افزار با دارا بودن توابع پایه و کلیدواژه های متنوع، قابلیت انجام پیچیده ترین محاسبات کوانتومی را دارا می باشد و به محققان امکان بررسی بسیاری از خواص سیستم ها، پارامترهای ساختاری و شیمیایی و همچنین پیش بینی مسیر واکنش های مختلف را می دهد.



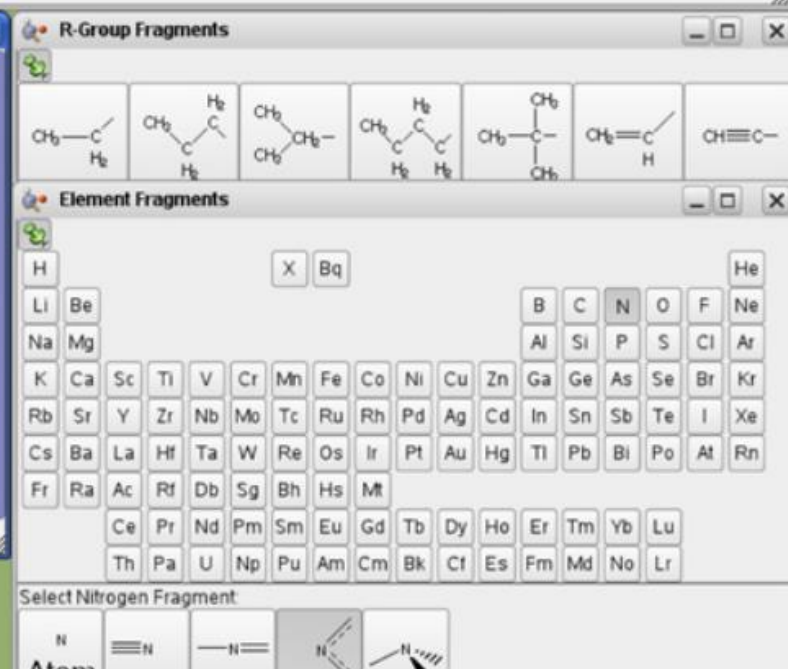
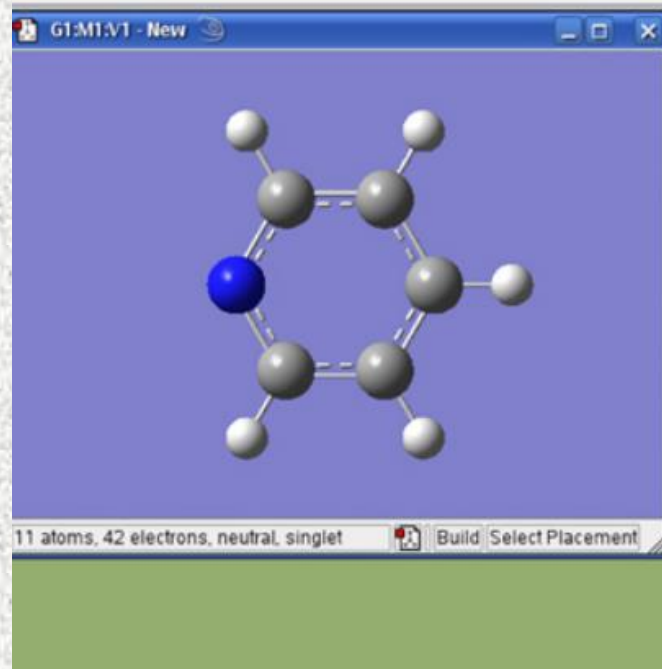
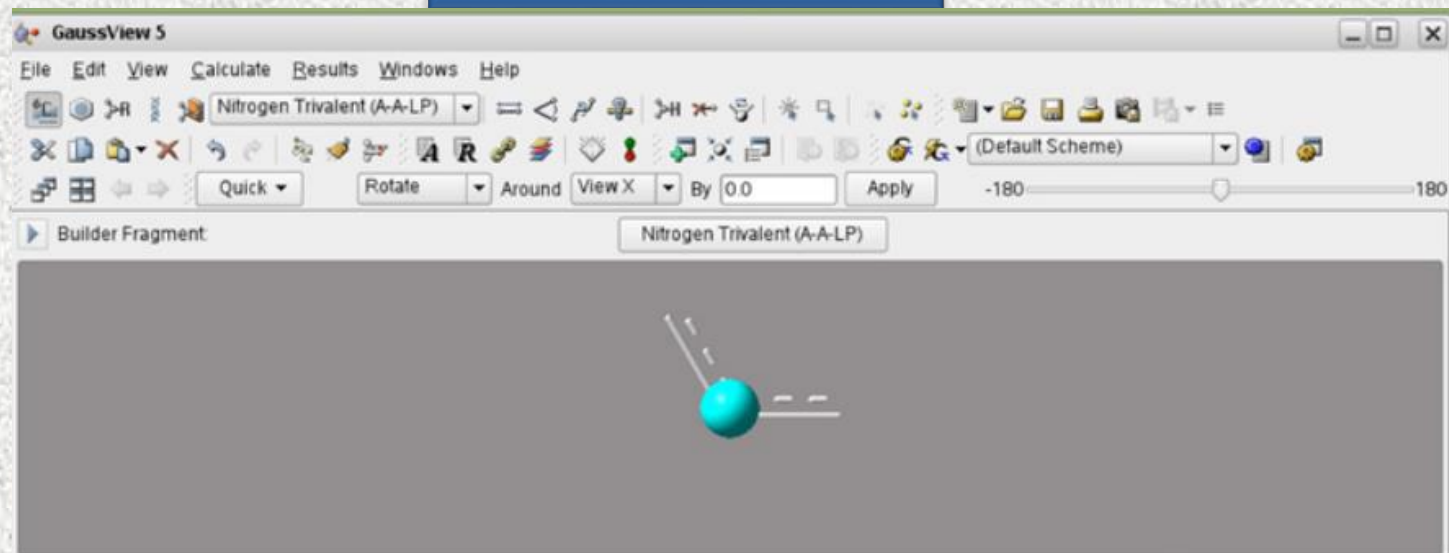
Gaussian

The image shows a screenshot of the Gaussian 09 Revision A.01 software interface. The window title is "Gaussian 09 Revision-A.01". The menu bar includes "File", "Process", "Utilities", "View", and "Help". The toolbar contains icons for job control (start, pause, stop), current batch job (refresh), output filename (search), and editing icons (undo, redo). Below the menu bar and toolbar are fields for "Batch Data:", "Active Job:", "Run Progress:", "Processing:", and "Output File:". The "Active Job:" field shows "C:\Jobs\methylpropene.aif" and the "Output File:" field shows "methylpropene.out". The "Run Progress:" field shows "C:\G09W\J502.exe is processing...". The main display area shows Gaussian output text, including parameters like "HarFok:", "ScaDPK:", "PoFCou:", "Omega=", "NMat0=", "IiCent=", and "Virtual" orbitals. The status line at the bottom indicates "Iteratively Solving the Self-Consistent Field Equations".

Labels and components in the screenshot:

- Menu bar**: File Process Utilities View Help
- Job control icons**: Start, Pause, Stop
- Current batch job**: Refresh
- Output filename**: Search
- Editing icons**: Undo, Redo
- Batch control file**: Batch Data:
- Input filename**: Active Job:
- Job progress display**: Run Progress:
- Gaussian output area**: HarFok: IExCor= 402 AccDes= 0.00D+00 IRadAn= 1 IDoU= 1
ScaDPK= 1.000000 1.000000 1.000000 1.000000
PoFCou: FMM=F IPFlag= 0 FMFlag= 100000 FMFlg1= 0
NFxFlg= 0 DoJE=I BraDBF=F KetDBF=I FulRan=I
Omega= 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000 ICtrl= 1
NMat0= 1 NMatS0= 1 NMatI0= 0 NMatD0= 1 NMcDS0= 0 N
IiCent= 4 NGrid= 0.
Petite list used in PoFCou.
Initial guess orbital symmetries:
Occupied (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
Virtual (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
- Status line**: Iteratively Solving the Self-Consistent Field Equations

GaussView



GaussView

GaussView نرم افزاری قدرتمند برای ساخت و ترسیم ساختارهای مولکولی و همچنین رابطی گرافیکی برای برنامه محاسباتی Gaussian است.

ویژگیهای کلیدی:

- پشتیبانی از فرمت های مختلف مانند: pdb, mol, mol2, cif, cub, chk, fch
- ساخت فایل ورودی برای نرم افزار gaussian و امکان شروع محاسبه از داخل برنامه
- ساخت مختصات مولکول با استفاده از ابزارهای گرافیکی و ویرایش مختصات درونی ساختار
- نمایش مدهای ارتعاشی و اوربیتالهای مولکولی
- نمایش مسیر واکنش و رسم نمودار انرژی آن

File Edit View Calculate Results Windows Help

Carbon Tetrahedral

(Default Scheme)

Builder Fragment:

GaussView Tips (

i Did you

Mouse and Keyboard B
Window

A molecule in a view windo

Show tips at startup Previous tip Next tip Close

GaussView 5.0.9

GaussView 5.0

Web: www.gaussian.com
Email: info@gaussian.com
Voice: 203-284-2501
Fax: 203-284-2521

G Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St Bldg 40
Wallingford, CT 06492 USA

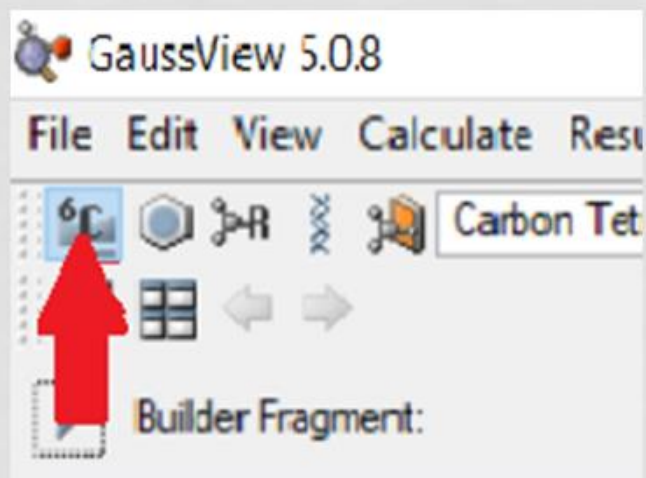
Copyright (c) 2000-2008 Semichem, Inc.
Authors: Roy D. Dennington II, Todd A. Keith and John M. Millam

0 atoms, 0 electrons, neutr Build Select Placement

معرفی ابزارهای GaussView

The image displays the GaussView software interface. At the top, the menu bar includes 'File', 'Edit', 'View', 'Calculate', 'Results', 'Windows', and 'Help'. Below the menu bar is a toolbar with various icons, and a dropdown menu showing 'formyl' and '(Default Scheme)'. A 'Builder Fragment' button is visible. The main workspace shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a central cyan atom and two white atoms. A 'Builder' window is open, titled 'G1:M1:V1 - New', with a blue background. The status bar at the bottom of the Builder window reads '0 atoms, 0 electrons, neutral, singlet' and 'Build Select Placement'. A vertical toolbar on the right side of the Builder window contains various icons for building molecules, including atoms (C, H, O, N, S, P, Cl, Br, I, F, Li, Na, K, Ca, Mg, Zn, Cu, Ag, Au, Pt, Pd, Ni, Fe, Co, Mn, Cr, V, Ti, Zr, Hf, Ta, Nb, Mo, W, Os, Ir, Rh, Ru, Rb, Cs, Ba, Sr, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hg, Pb, Bi, Po, At, Rn, Fr, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr), functional groups (alcohol, aldehyde, ketone, amine, amide, nitrile, alkene, alkyne, ether, sulfide, sulfone, sulfonamide, sulfonic acid, phosphine, phosphine oxide, phosphine sulfide, phosphine sulfone, phosphonic acid, phosphonic acid salt, phosphonic acid diester, phosphonic acid triester, phosphonic acid diester salt, phosphonic acid triester salt, phosphonic acid diester diester salt, phosphonic acid triester diester salt, phosphonic acid diester diester diester salt, phosphonic acid triester diester diester salt), and other tools like 'Build', 'Select', 'Placement', 'Help', and 'Close'.

معرفی نوار های بالا



- با کلیک بر روی این گزینه عناصر جدول تناوبی به نمایش گذاشته میشود.

Element Fragments

H					X	Bq										He	
Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Rhenium	Mt										
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

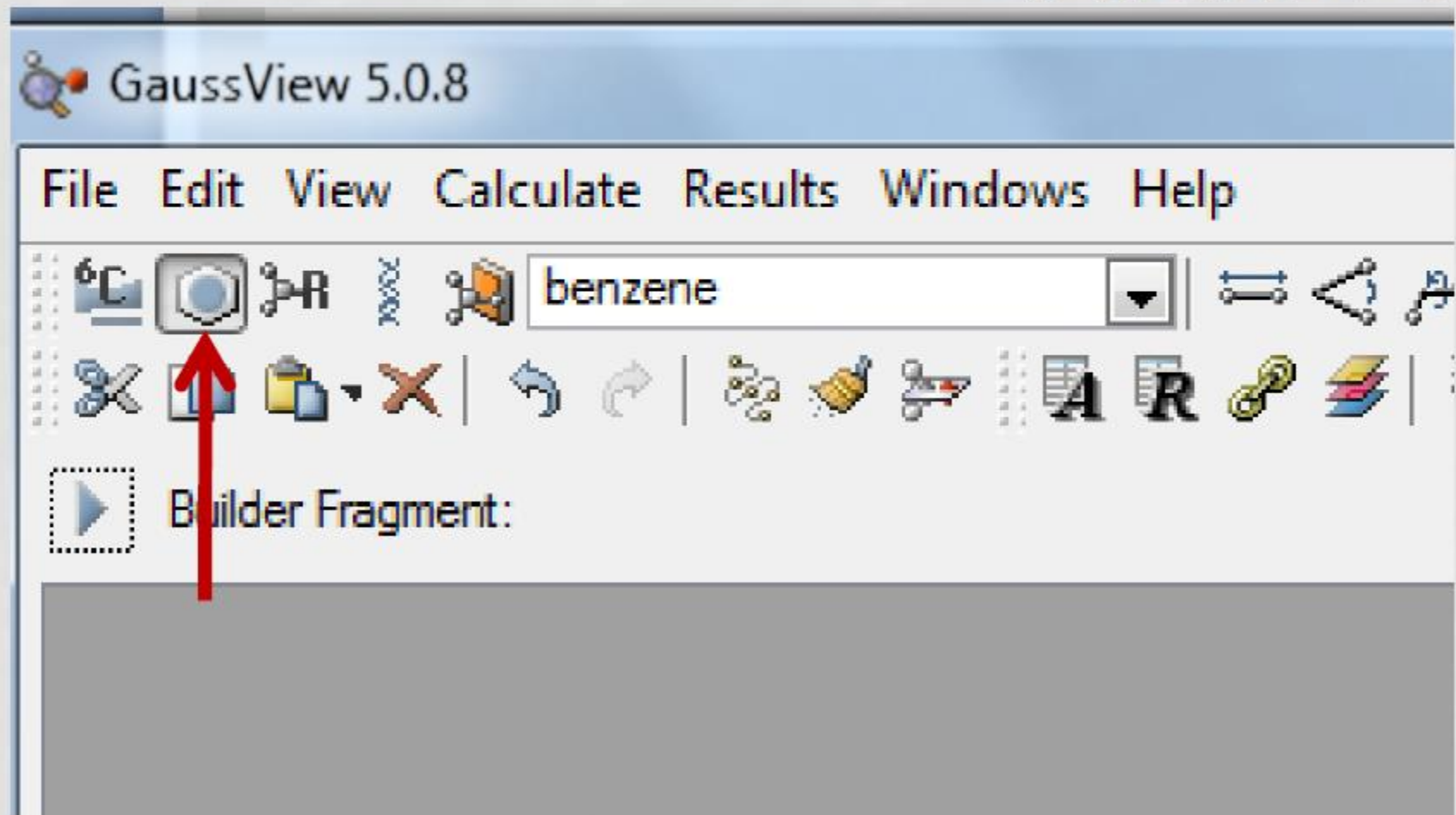
Select Carbon Fragment:

Atom					

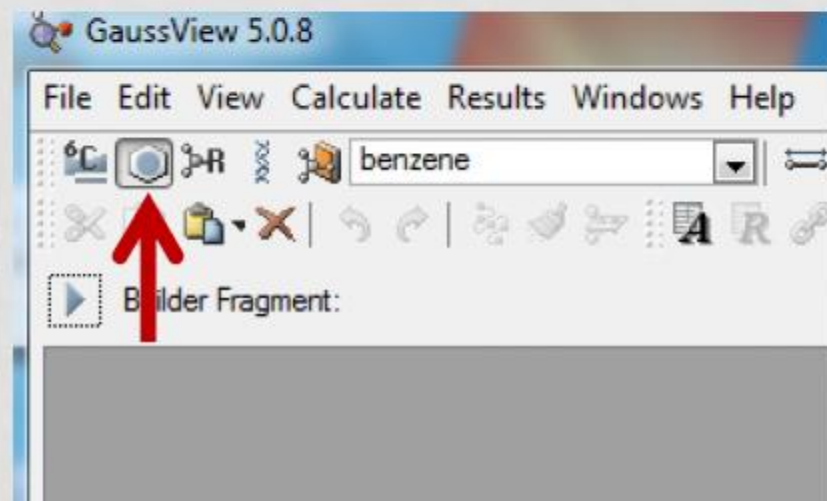
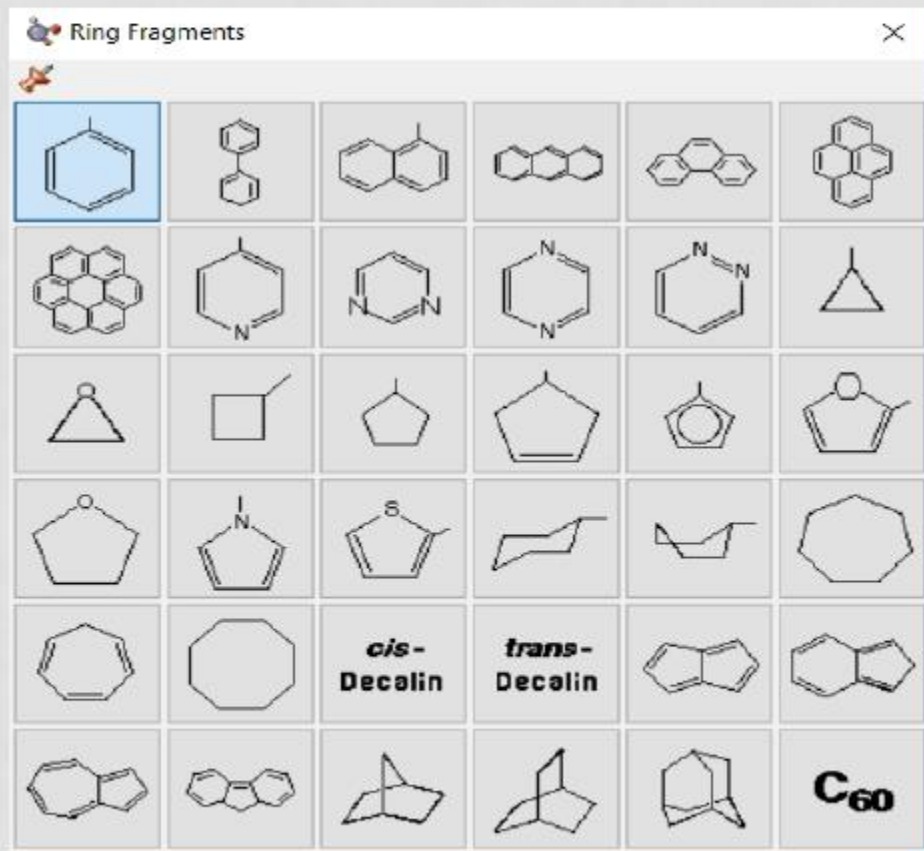
- عناصر جدول تناوبی و همچنین معین کردن نوع پیوند

ساختارهای پیش فرض موجود در نرم افزار

با کلیک بر روی این گزینه :



ساختارهای پیش فرض موجود در نرم افزار

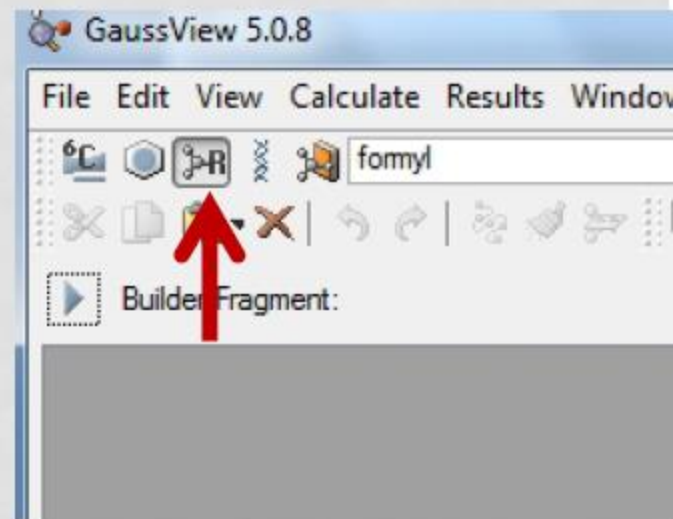


ساختارهای روبه رو
مشخص می شوند:



گروه های پیش فرض در نرم افزار

با کلیک بر روی این گزینه:



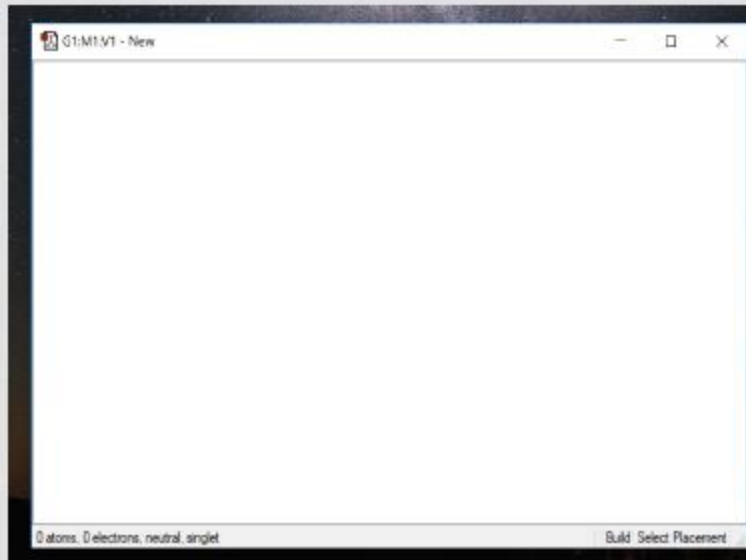
R-Group Fragments

		OMS	OTS			

گروه های زیر
مشخص می شود:

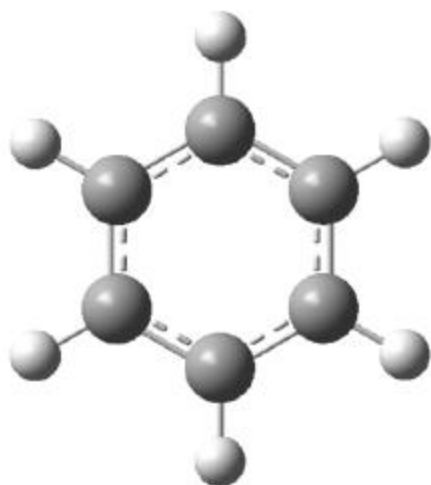
نحوه ساخت مولکول

- مسیر زیر را برای باز کردن صفحه دنبال میکنیم:
- File → new → create moleculegroup
- یا میانبر زیر را استفاده میکنیم:
- Ctrl + N
- یک صفحه باز میشود :



همه چیز با یک کلیک راست شروع میشود

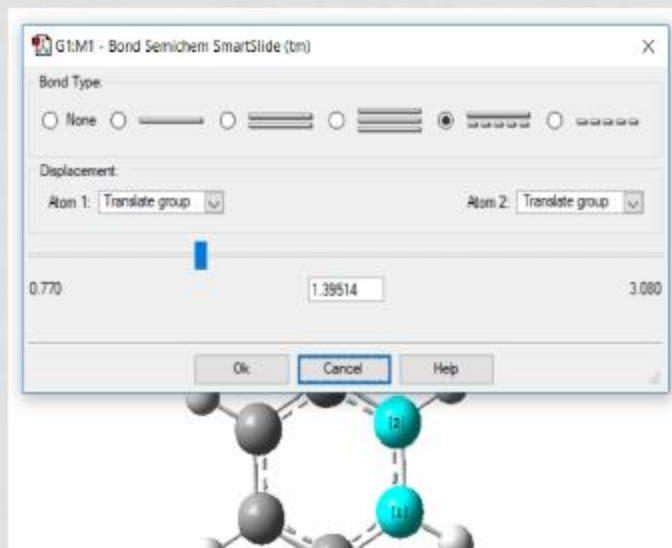
- با کلیک راست کردن و انتخاب گزینه Builder داریم :
با انتخاب فرضاً بنزن و کلیک روی صفحه سفید، بنزن رسم میشود.



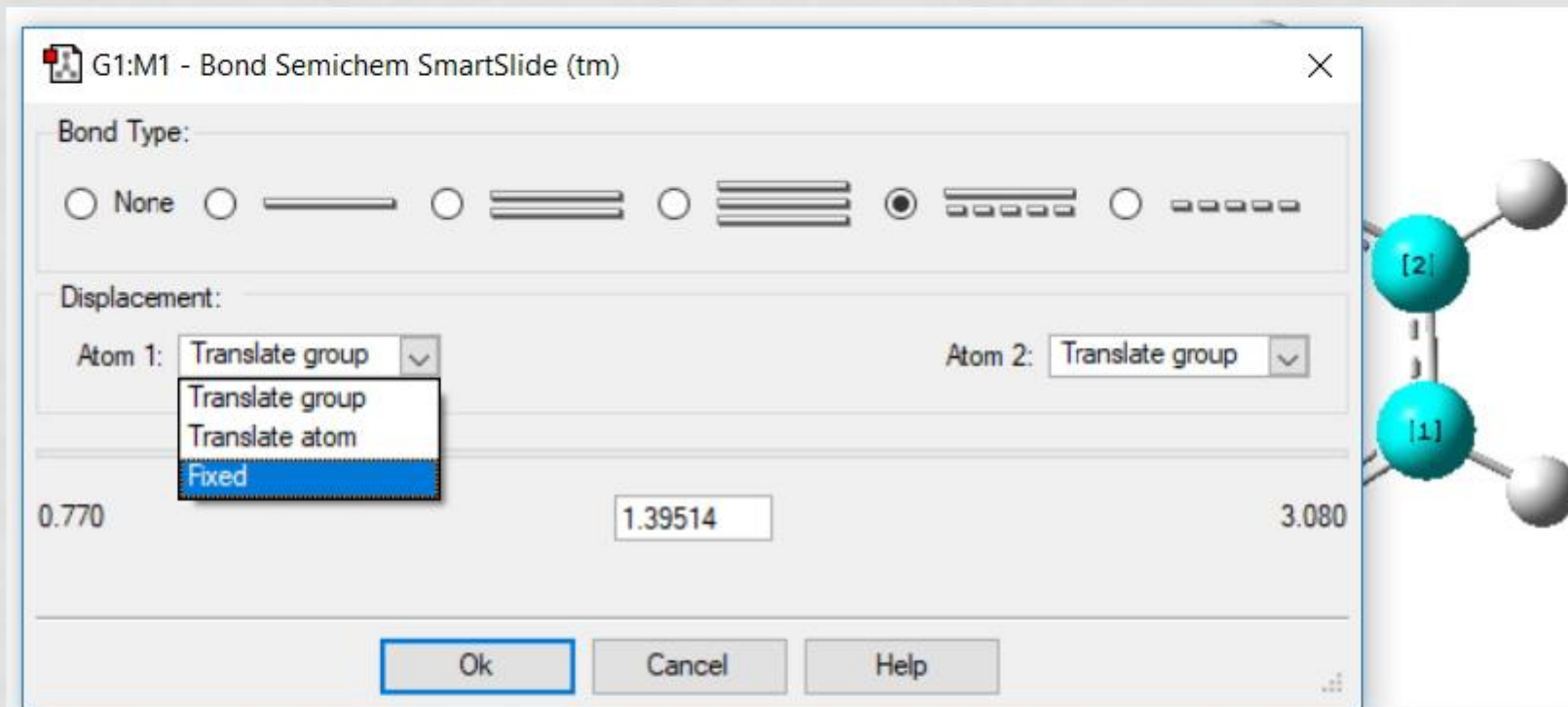
با نگهداشتن کلیک و چرخاندن ماوس مولکول را میتوان از زوایای مختلف دید.

تغییر در پیوند ها

- با کلیک راست و انتخاب گزینه Modify bond را میزنیم
 - سپس با انتخاب اتم های پیوند مورد نظر داریم :

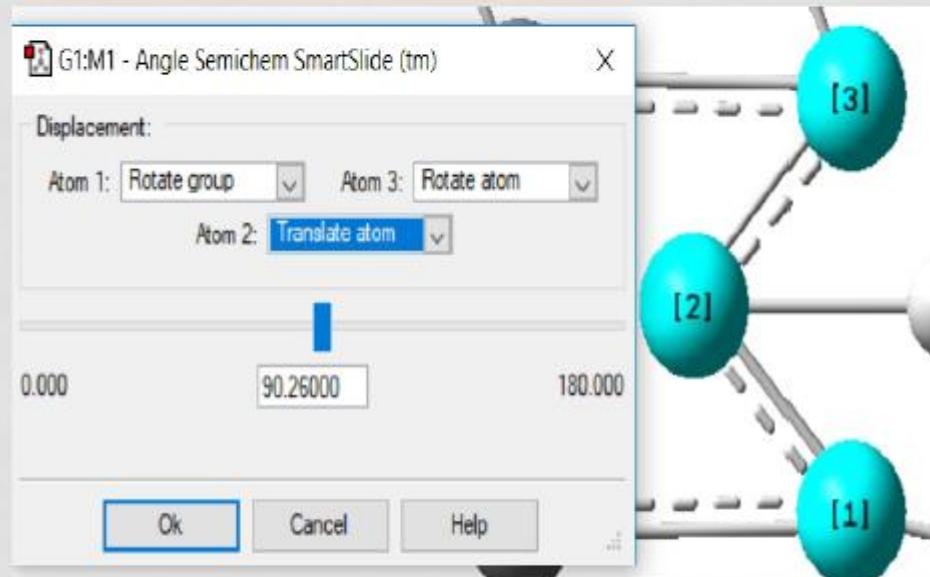


که میتوانیم نوع پیوند و فاصله پیوند را تغییر دهیم (حتی با ثابت نگه داشتن یک اتم)



- با انتخاب گزینه Fixed، اتم یک ثابت می ماند و اتم دو دورتر یا نزدیکتر میشود

تغییر زاویه بین اتم ها



- انتخاب گزینه Modify angle
 - انتخاب ۳ اتم
 - باز شدن پنجره روبرو

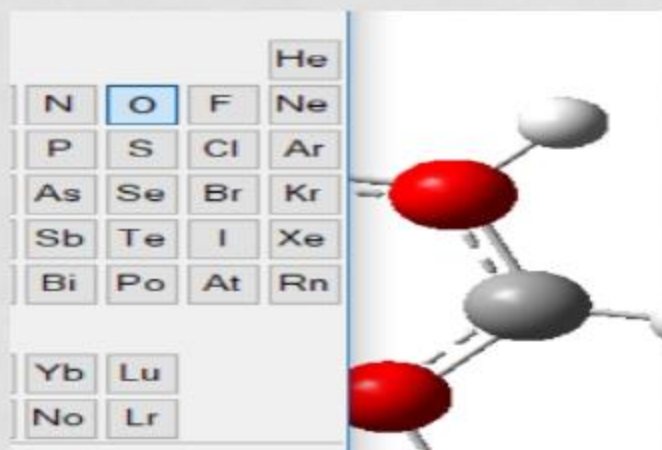
- تغییر زاویه با ثابت نگهداشتن یک اتم،
 - یک گروه و ...

اضافه کردن والانس

گزینه Add valence

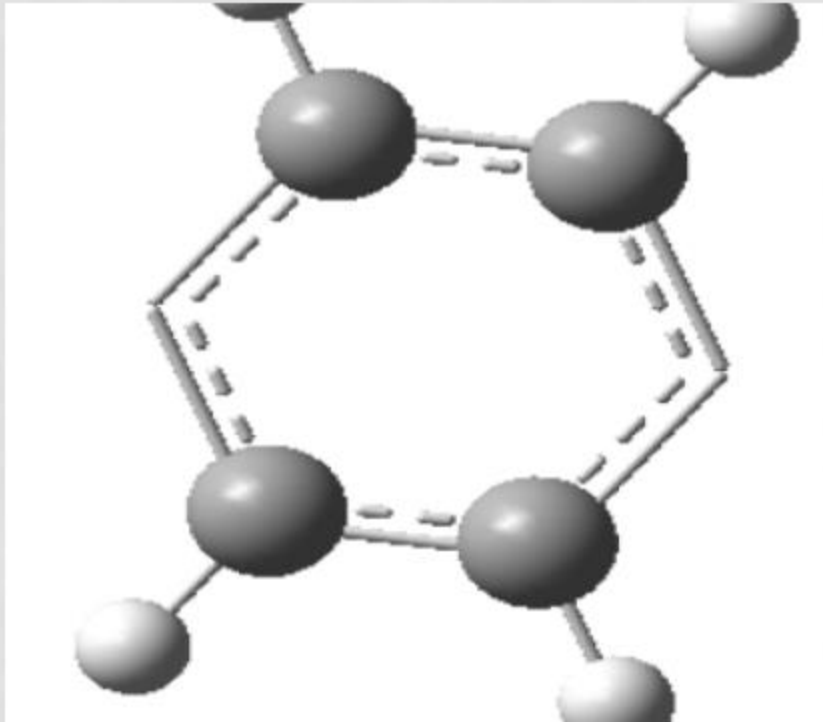
- به طور پیش فرض هیدروژن اضافه میکند
 - فقط کافیست روی هر اتمی که مد نظر است کلیک کنیم
- با انجام روند زیر و انتخاب اتم مثلا اکسیژن ، با کلیک روی اتم های مولکول موردنظر ، اتم اکسیژن جایگزین میشود

Right click → Builder → Element Fragment



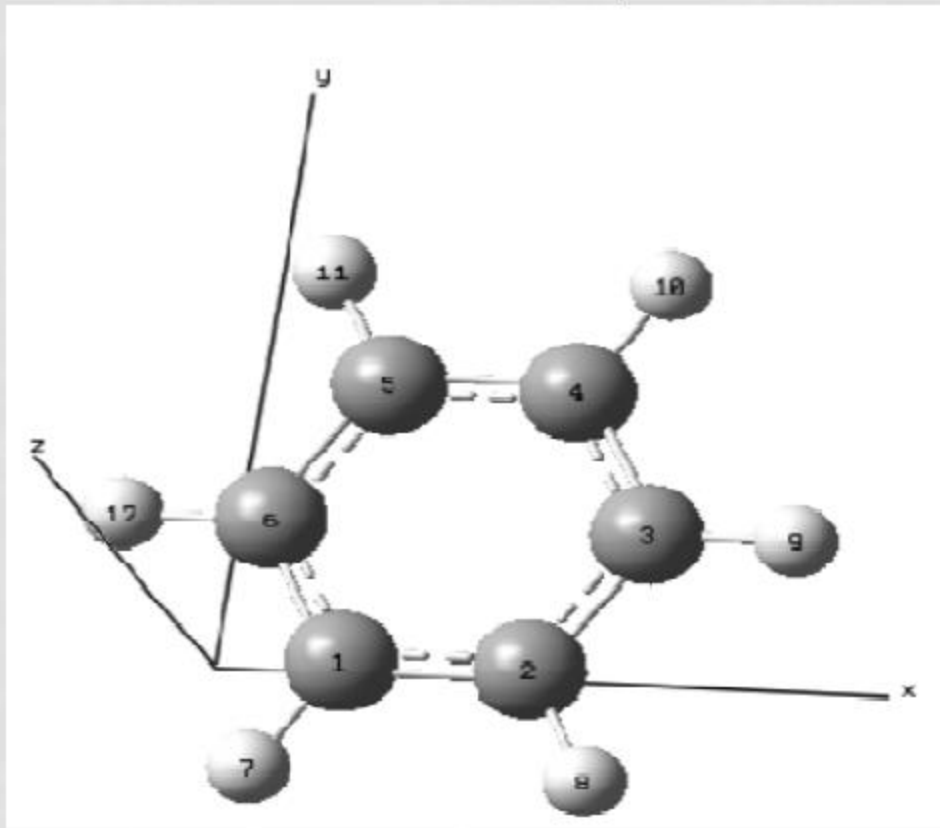
Delete Atom

- با انتخاب این گزینه و کلیک روی هر اتم ، اتم مورد نظر حذف میشود.



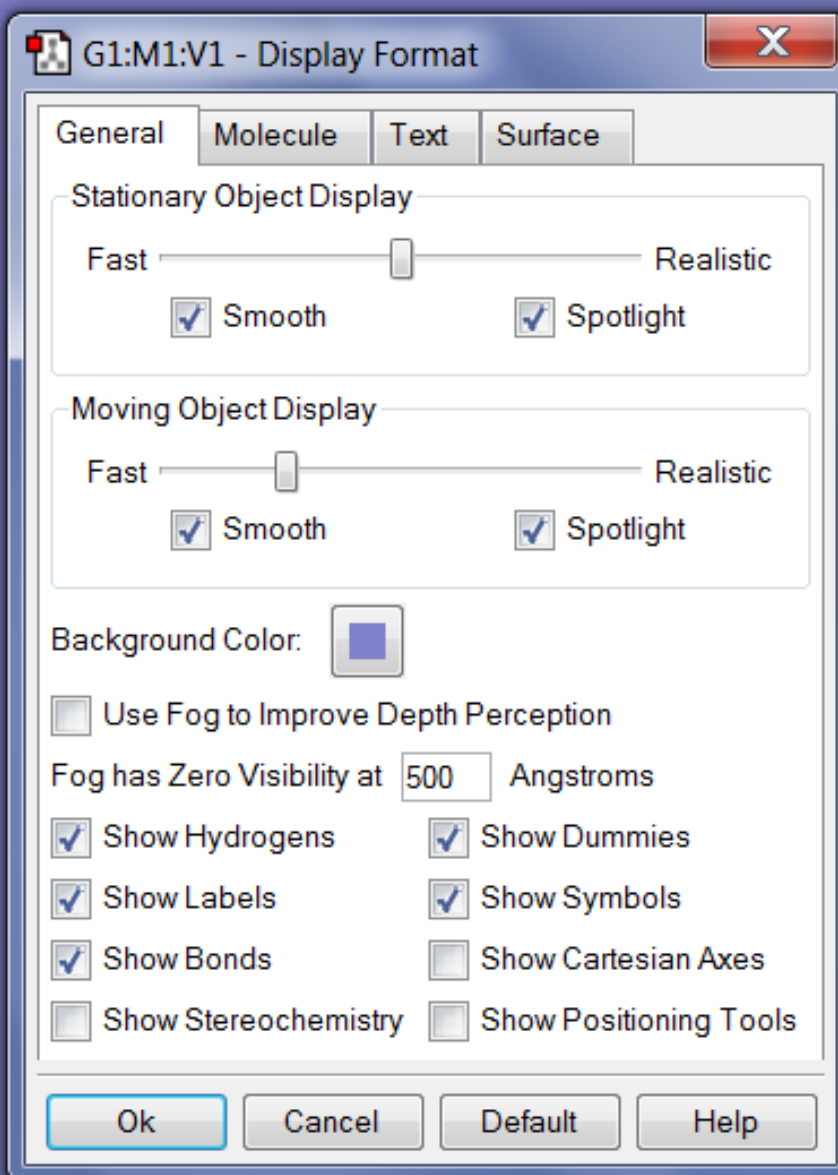
گزینه های موجود در View

- label که شماره گذاری میکند.
- Cartesian Axes که محور های مختصات را رسم میکند.



- و یکسری امکانات دیگر...

Display Format



ذخیره کردن فایل و انجام مقدمات محاسبات

- با انجام روند زیر فایل را ذخیره میکنیم.
- Right click → File → save

```
12 - Notepad
File Edit Format View Help
%chk=C:\Users\Asus\Desktop\12.chk
# hf/3-21g geom-connectivity

Title Card Required

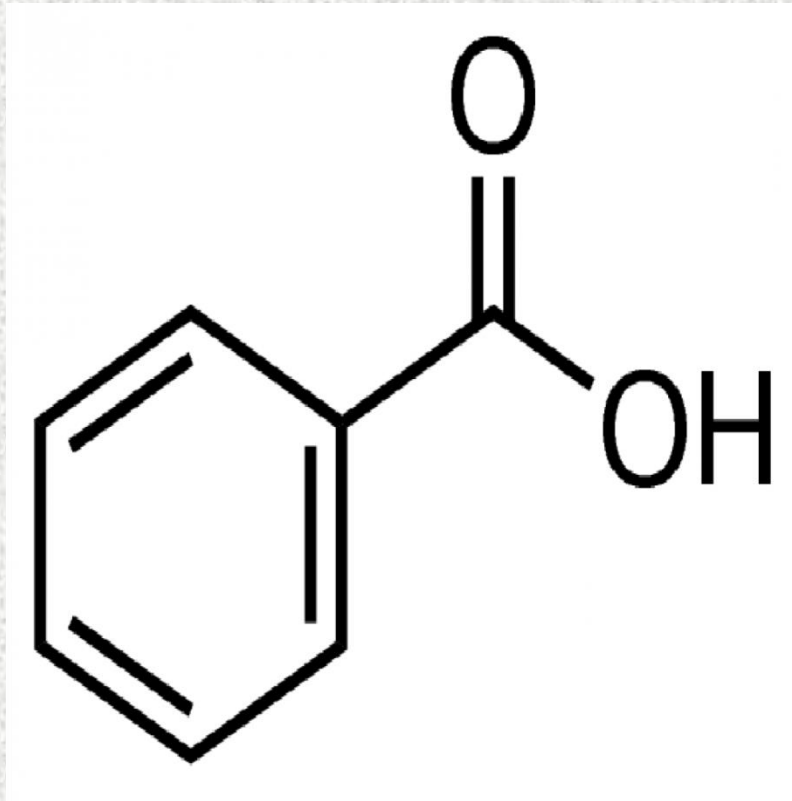
@ 1
C          -0.02557545   -1.06138106    0.00000000
C          1.36958455   -1.06138106    0.00000000
C          2.06712255    0.14636994    0.00000000
C          1.36946855    1.35487894   -0.00119900
C          -0.02535645    1.35480094   -0.00167800
C          -0.72295745    0.14659494   -0.00068200
H          -0.57533445   -2.01369806    0.00045000
H          1.91909255   -2.01389406    0.00131500
H          3.16680255    0.14644994    0.00063400
H          1.91966855    2.30702194   -0.00125800
H          -0.57547845    2.30708194   -0.00263100
H          -1.82256145    0.14677794   -0.00086200

1 2 1.5 6 1.5 7 1.0
2 3 1.5 8 1.0
3 4 1.5 9 1.0
4 5 1.5 10 1.0
5 6 1.5 11 1.0
6 12 1.0
7
8
9
10
11
12
```

- فایل با فرمت Gzif ذخیره میشود.
- فایل را با برنامه Notepad باز میکنیم.
- تصویر روبرو نمایش مولکول مورد نظر است.

مثال

رسم ساختار بنزویک اسید



تمرین

۱- ساختار استیک اسید (CH_3COOH) را رسم کنید

۲- طول پیوند کربن-کربن را $1/71$ آنگستروم تنظیم نمایید

۳- زاویه پیوند اکسیژن-کربن-اکسیژن را به 100 درجه تغییر دهید

۴- نمادهای شیمیایی عناصر با فونت ۲۴ نمایش داده شوند

۵- رنگ پس زمینه را به صورت دلخواه تغییر دهید

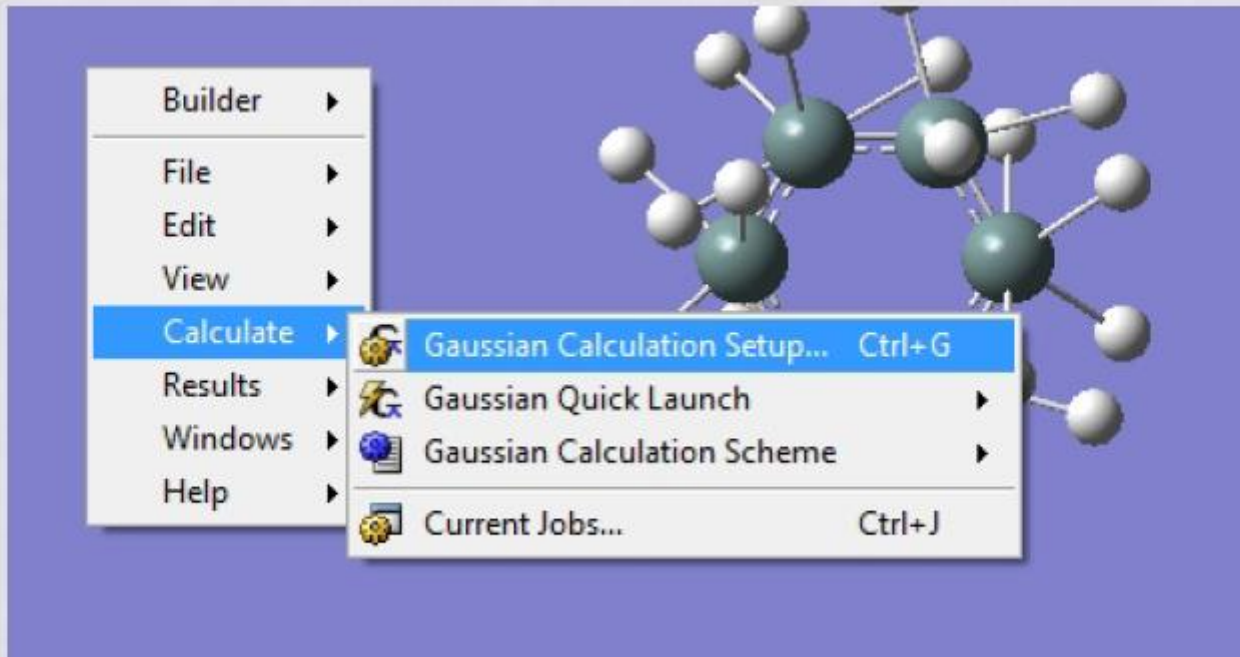
۶- تصویر مولکول را با پسوند (JPG) ذخیره کنید

دو راه برای انجام محاسبات در گوسین وجود دارد:

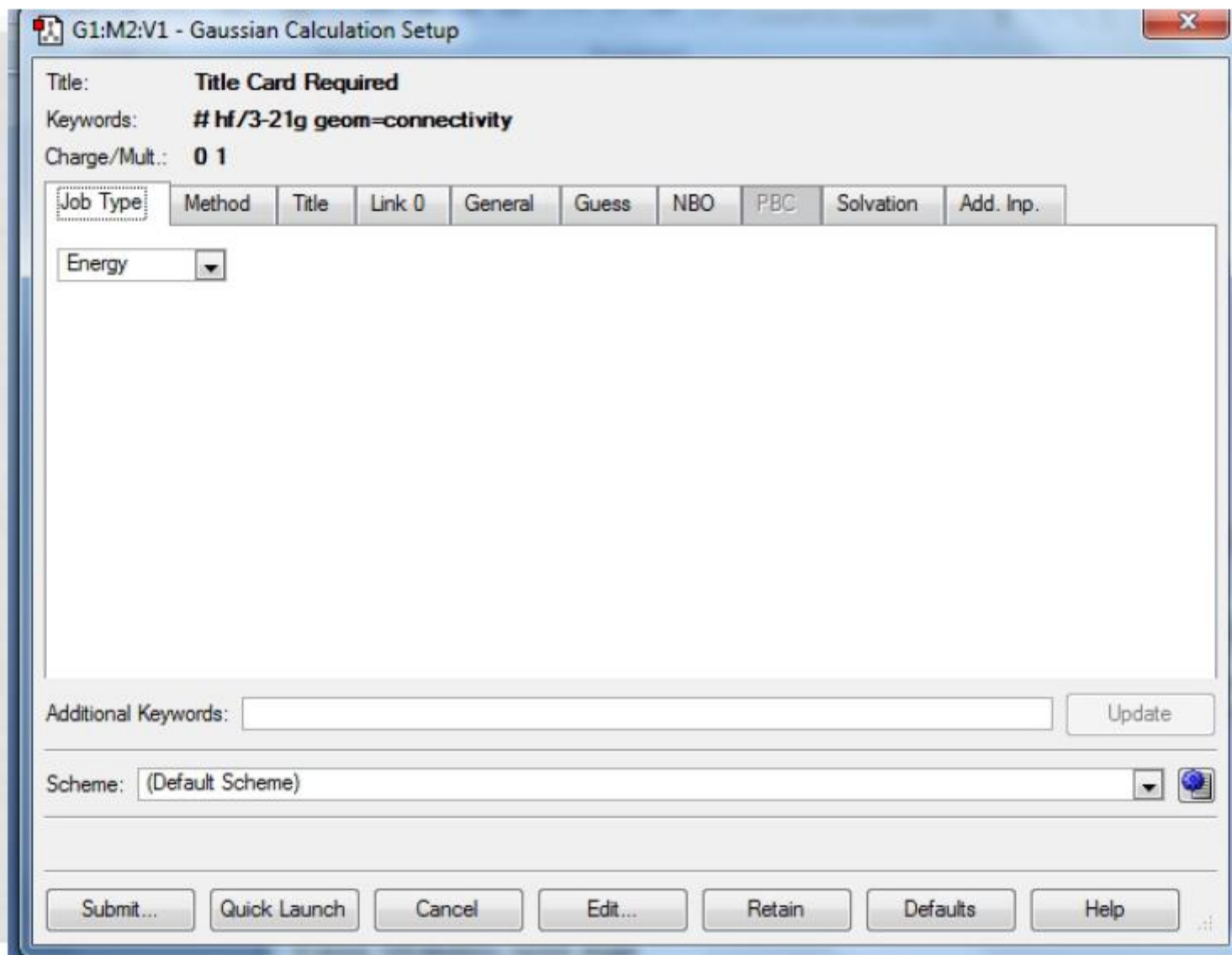
- ۱- باز کردن فایل ذخیره شده با نوت پد و اعمال دستورات بصورت دستی در آن.
- اگر دقیقاً می دانیم که از گوسین چه می خواهیم و شیوه دستور نویسی آشنایی داریم دیگر نیازی به استفاده از روش گرافیکی نیست و تنها در یک خط، همه آن چیزی که در بخش دستورات گرافیکی گفته شده را می توان خلاصه کرد.
- ۲- باز کردن فایل ذخیره شده با **GuassView** و اعمال دستورات بصورت گرافیکی

اعمال دستورات بصورت گرافیکی

- در این روش فایل ذخیره شده با پسوند gjf را مجدداً توسط نرم افزار GaussView باز کرده و مراحل زیر را دنبال می کنیم:
- Right Click --> Calculate ---> Gaussian Calculation Setup

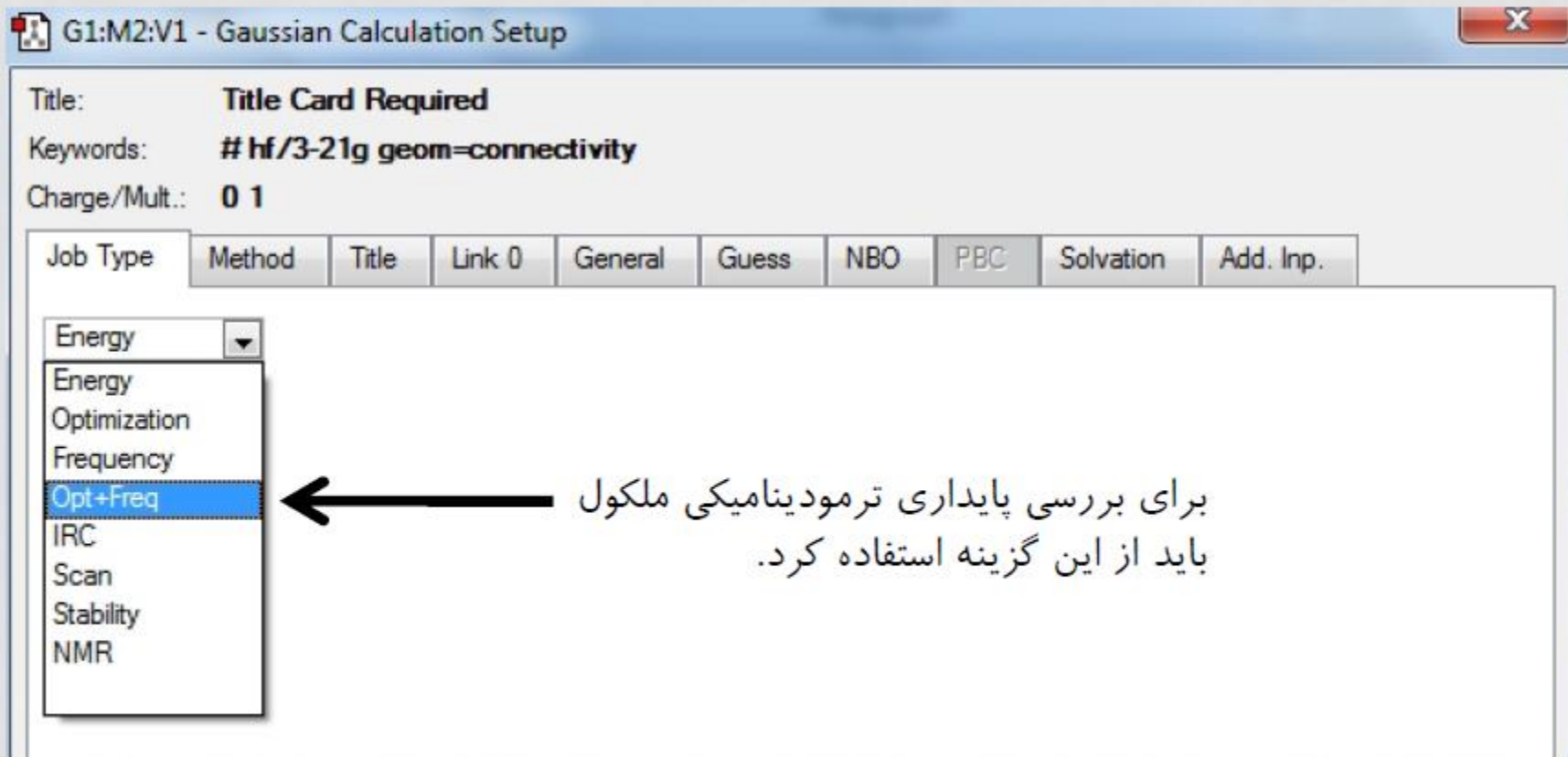


با اجرای دستورات فوق صفحه تنظیمات ظاهر می شود



در صفحه فوق JOB TYPE و METHOD حتما باید تنظیم شوند

• تنظیمات Job Type



The screenshot shows the 'Gaussian Calculation Setup' window. The 'Job Type' dropdown menu is open, showing options: Energy, Optimization, Frequency, Opt+Freq (highlighted), IRC, Scan, Stability, and NMR. An arrow points to the 'Opt+Freq' option.

Energy
Energy
Optimization
Frequency
Opt+Freq
IRC
Scan
Stability
NMR

← برای بررسی پایداری ترمودینامیکی ملکول باید از این گزینه استفاده کرد.

Title: **Title Card Required**
Keywords: **# hf/3-21g geom=connectivity**
Charge/Mult.: **0 1**

Job Type | Method | Title | Link 0 | General | Guess | NBO | PBC | Solvation | Add. Inp.

با اعمال تنظیم فوق مجموعه ای از تنظیمات ظاهر می شود که لزوما نیازی به تغییر آن ها نیست

G1:M2:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **Title Card Required**
Keywords: **# opt freq hf/3-21g geom=connectivity**
Charge/Mult.: **0 1**

Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	NBO	PBC	Solvation	Add. Inp.
----------	--------	-------	--------	---------	-------	-----	-----	-----------	-----------

Opt+Freq

Optimize to a: Minimum Use RFO step Use Quadratic Macrostep

Calculate Force Constants: Never Use tight convergence criteria

Compute Raman: Default Compute VCD Save Normal Modes

Compute ROA: No Read Incident Light Freqs: Default Skip diag. of full matrix

Select Normal Modes Modes: Atoms:

Anharmonic Corrections Specify Anharmonic Modes:

Additional Keywords: Update

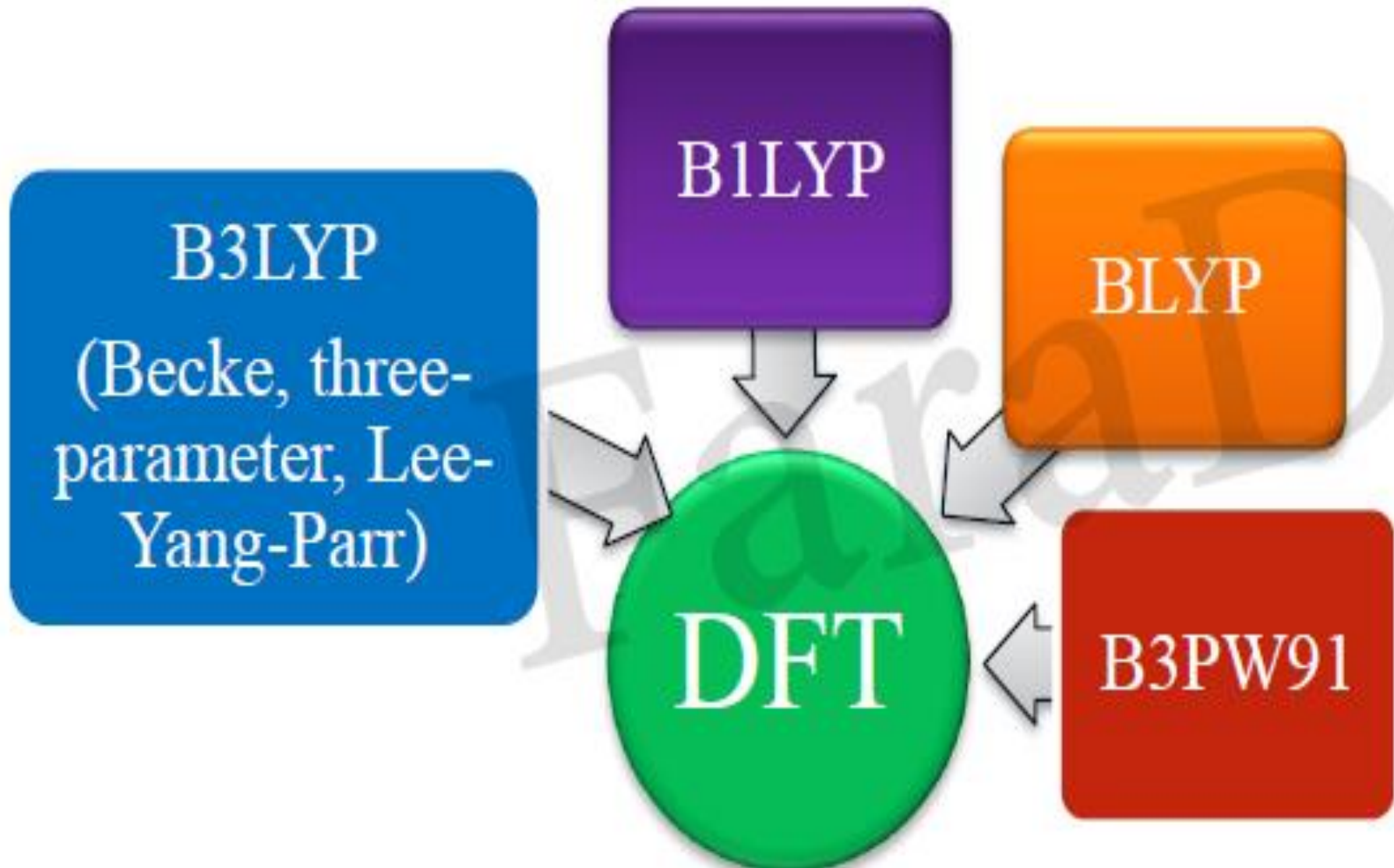
Scheme: (Unnamed Scheme)

Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults Help

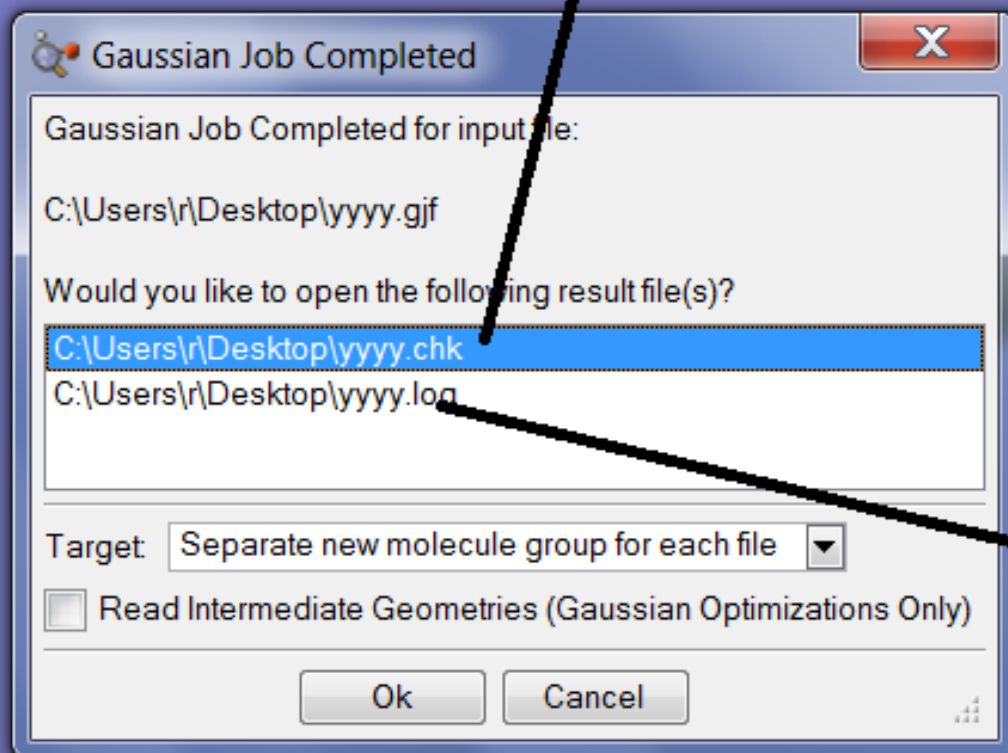
تنظیمات METHOD

روش های متفاوتی برای محاسبات کوانتومی وجود دارد. هر روش مزایا و معایبی دارد و می تواند پارامترهای خاصی را اندازه گیری کند. یکی از مهم ترین تفاوت های روش های کوانتومی، تفاوت در زمان انجام محاسبه است. پایه ای ترین، ساده ترین و سریع ترین روش محاسبات Hartree-Fock (HF) است. هرچند دقت این روش کم می باشد اما برای اطمینان از درستی ساختارهای رسم شده و جلوگیری از ایجاد error بسیار مناسب است. روش های دیگر مانند DFT و MP2 همگی برپایه HF هستند و تصحیحاتی را روی آن انجام می دهند تا نتایج بهتری حاصل شود.

در هر روشی علاوه بر نوع روش باید سری پایه (Basis Set) نیز تعیین گردد. سری های پایه تعیین می کنند که در محاسبات، اوربیتال ها تا چه حدی و با چه توابعی وارد محاسبه شوند. آگاهی از سری های پایه کمک می کند تا محاسبات اضافی انجام نشده و در زمان صرفه جویی شود.



خروجی chk



فایل out

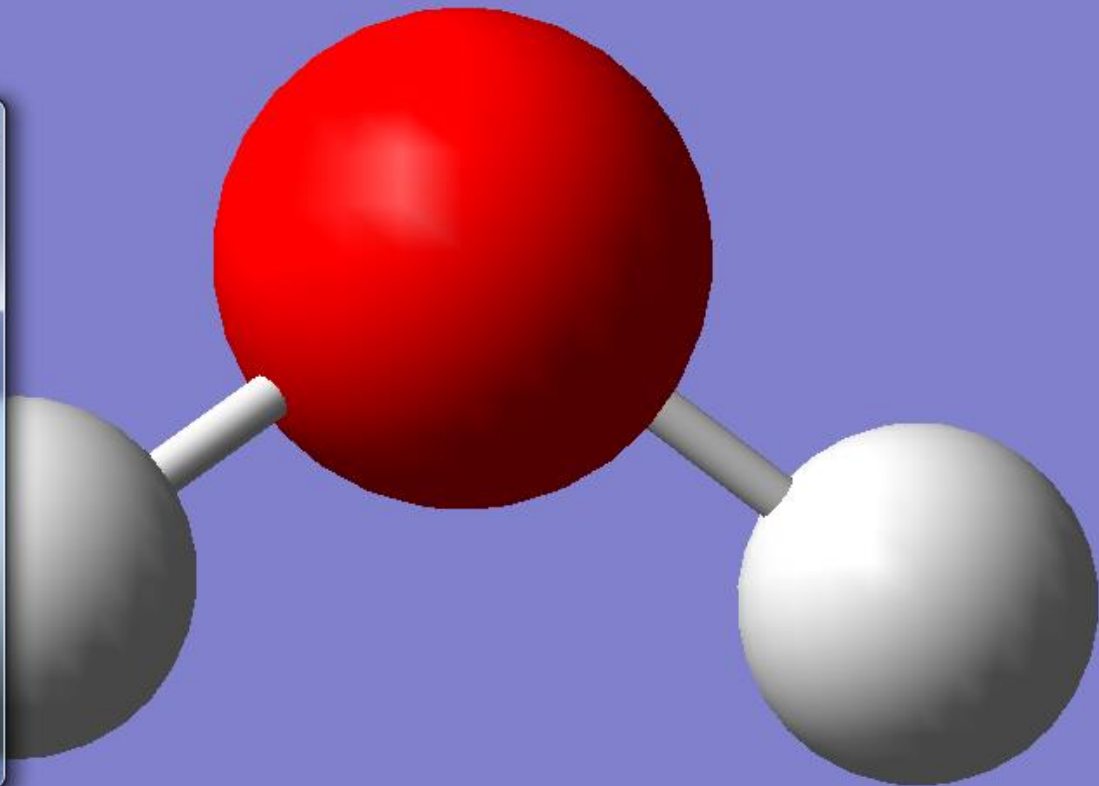
summary

G2:M1:V1 - Gaussian Calculation Su... X

Title Card Required

File Name	gty	
File Type	.chk	
Calculation Type	SP	
Calculation Method	RB3LYP	
Basis Set	CC-PVTZ	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Total Energy	-76.45926185	a.u.
RMS Gradient Norm	0.00000000	a.u.
Imaginary Freq		
Dipole Moment	1.8444	Debye
Point Group		

Ok View File Save Data



تمرین

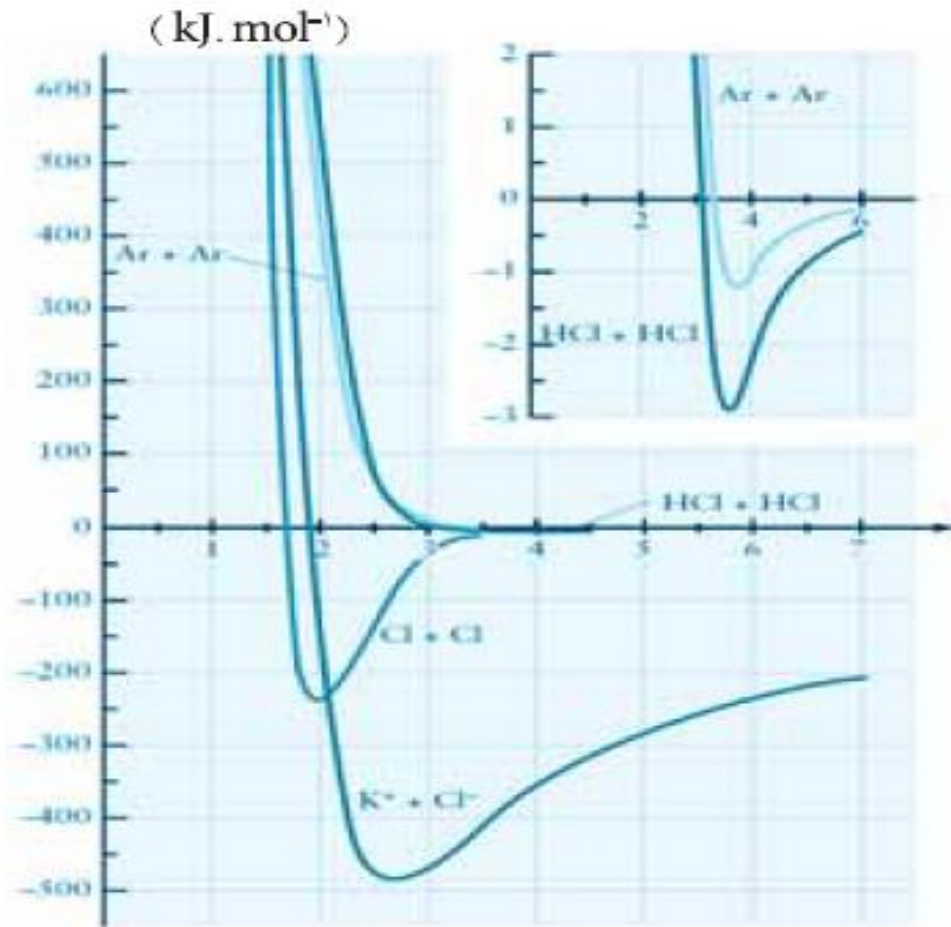
با استفاده از روش **DFT** تابع **B3LYP** و سری پایه **CC-PVDZ** موارد زیر را برای مولکول آب تعیین کنید

انرژی نهایی مولکول (Total Energy)

گشتاور دو قطبی مولکول (Dipole Moment)

گروه نقطه ای (Point Group)

انرژی پتانسیل بین ذره های کوچک و ساده



نمودار ۱ مقایسه انرژی پتانسیل برای چند ذره

انرژی پتانسیل بین ذره‌ها، به فاصله میان آن‌ها بستگی دارد. به بیان ساده‌تر، انرژی پتانسیل میان یک جفت یون یا یک جفت اتم، به فاصله موجود میان مرکز آن‌ها از یکدیگر وابسته است. همچنین فاصله میان دو مولکول - که از مرکز اتم با بار جزئی مثبت از یک مولکول، تا مرکز اتم با بار جزئی منفی از اتم مولکول همسایه در نظر گرفته می‌شود - تعیین‌کننده انرژی پتانسیل میان دو مولکول است.

برهم‌کنش میان دو اتم $\text{Cl} >$ برهم‌کنش میان K^+ و Cl^-
 $\text{Cl} \dots \text{Cl}$ $\text{K}^+ \dots \text{Cl}^-$

قطبی یا ناقطبی بودن مولکول ها

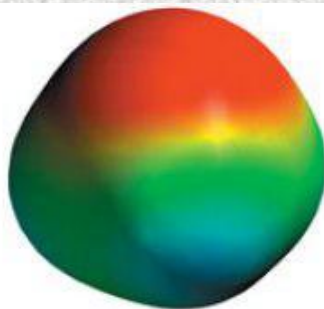
تشخیص قطبی یا ناقطبی بودن مولکول به کمک عدد گشتاور دو قطبی مولکول

استفاده از شواهد تجربی (جهت گیری در میدان الکتریکی)

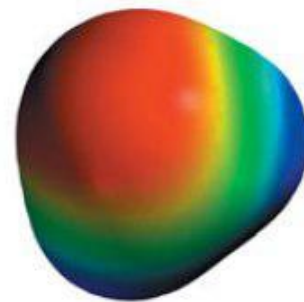
تشخیص قطبی یا ناقطبی بودن مولکول با توجه به "نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول"



electrostatic potential map for methane



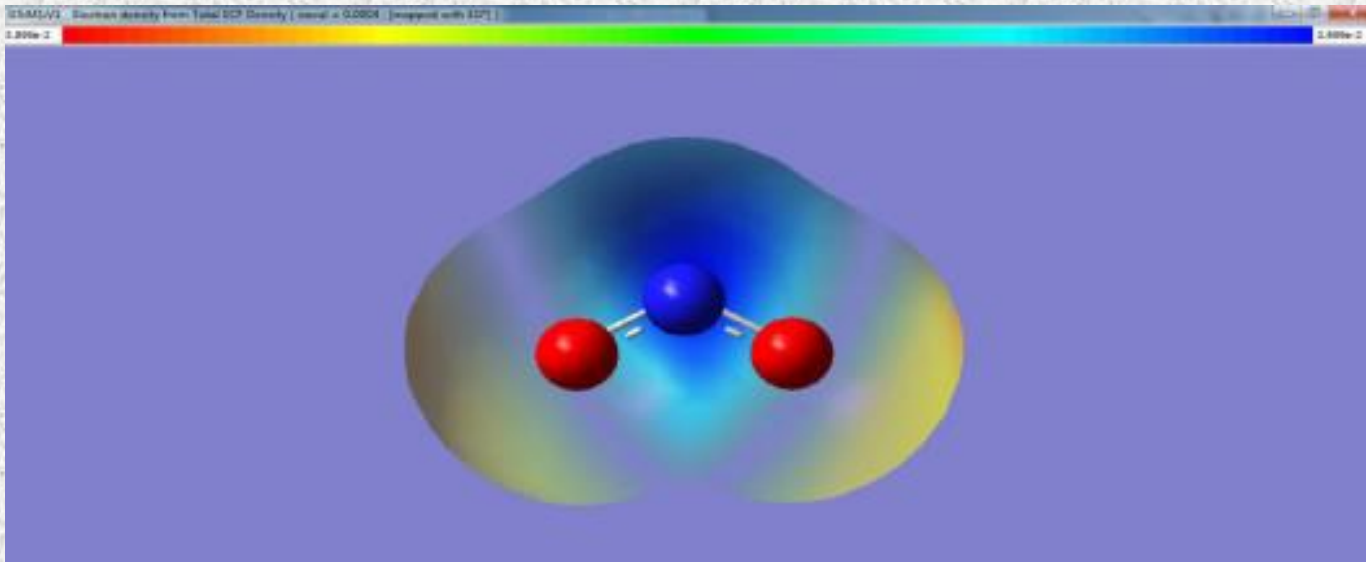
electrostatic potential map for ammonia



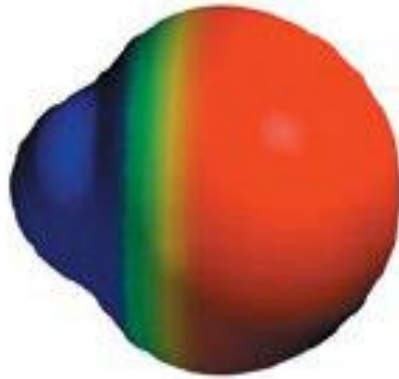
electrostatic potential map for water

نقشه چگالی الکترونی

نقشه های پتانسیل الکتروستاتیکی، نمودارهای سه بعدی اند که با کمک محاسبات رایانه ای بدست می آیند نقشه های پتانسیل الکتروستاتیکی ابزار مناسبی برای تعیین میزان تراکم بارالکتریکی روی اتم های سازنده یک ترکیب اند. این نقشه های در تعیین جهت گشتاور دوقطبی یک ترکیب، الکترون دهنده یا الکترون کشنده بودن یک گروه و واکنش پذیری مواد و .. به کار می روند



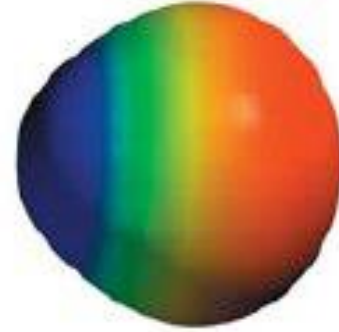
نقشه چگالی الکترونی



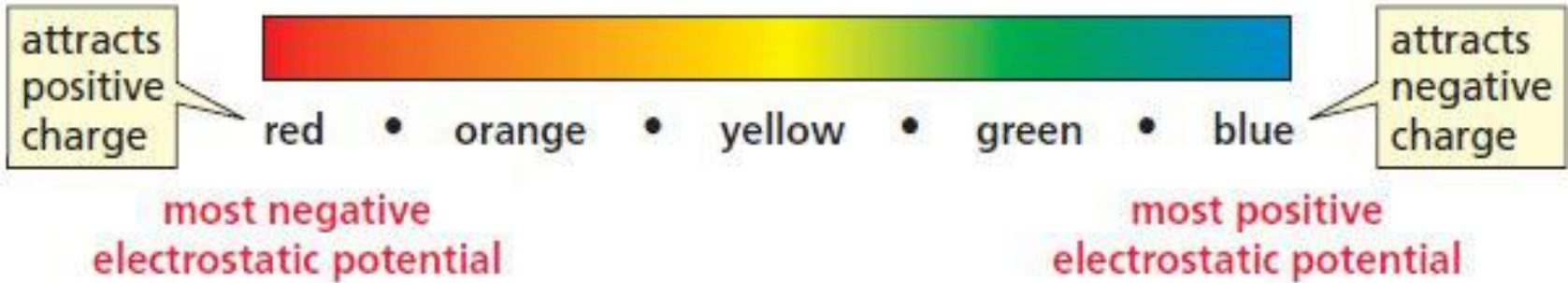
LiH



H₂



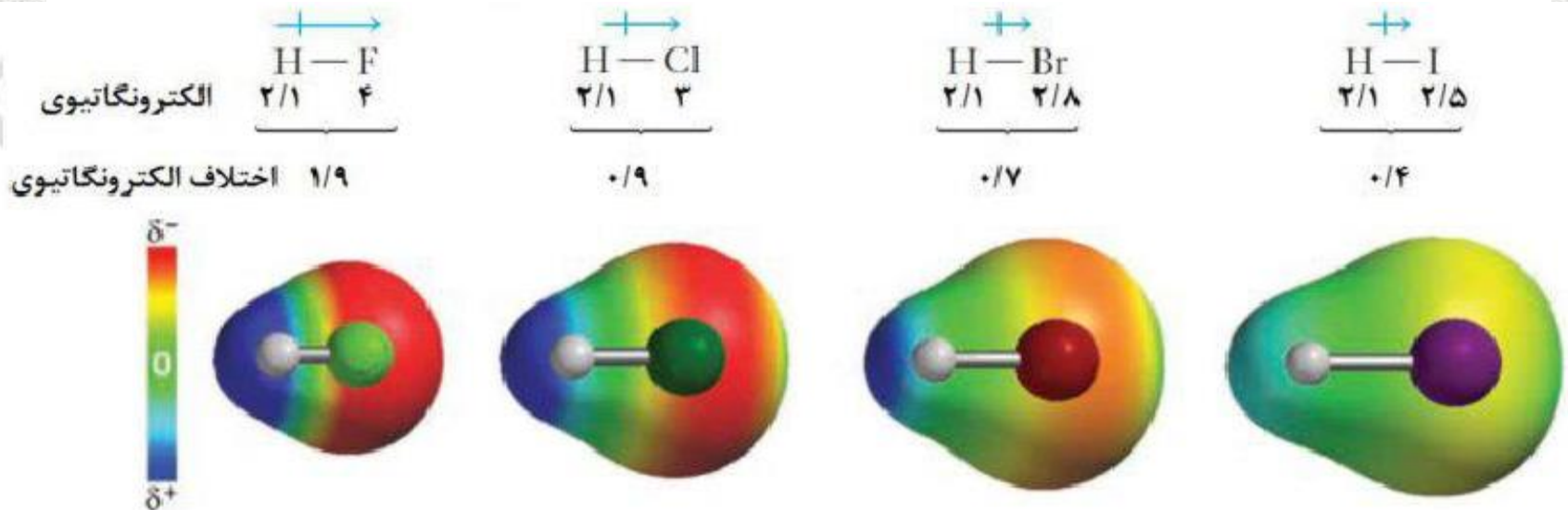
HF



مفهوم رنگ ها در نقشه پتانسیل :

در این نقشه ها از رنگ های قرمز ، آبی ، سبز و زرد و ... استفاده شده است. که در کتاب درسی برای آسان سازی تدریس عمدتاً از دورنگ مهم قرمز و آبی و در برخی موارد سبز و ... استفاده کرده است.

سمتی از مولکول که قطب مثبت آن است (ناحیه آبی) و یک سمت دیگر را قطب منفی (ناحیه قرمز) تشکیل می دهد. که ممکن است این رنگ ها روی اتم خاصی نباشد.

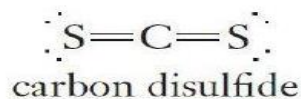
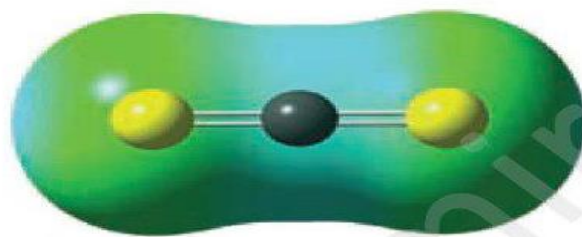


درحقیقت ناحیه قرمز رنگ، ناحیه ای است که تراکم بارالکتریکی منفی دارد و قطب منفی مولکول قطبی را تشکیل می دهد.

و ناحیه آبی، ناحیه ای است که تراکم بار الکتريکی مثبت دارد و قطب مثبت مولکول قطبی را تشکیل می دهد.

البته این رنگ ها در نقشه پتانسیل مولکول های ناقطبی هم هستند و نشانگر میزان تراکم بارالکتریکی هستند که نشان می دهد توزیع ابرالکترونی اطراف اتم یا اتم های مرکزی در مولکول های ناقطبی یکنواخت است.

δ^-
 0
 δ^+



آ ☆ برای مولکول های دواتمی :

تقارن رنگی یا شکل ظاهری متقارن در نقشه پتانسیل مولکول دواتمی نشان دهنده مولکول ناقطبی است . مانند مولکول های : H_2 ، F_2 ، Cl_2 و....

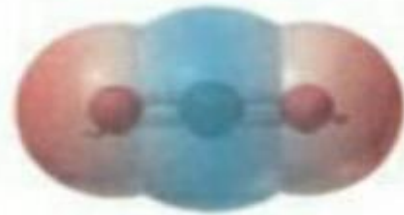


و عدم تقارن موارد مذکور در مولکول دواتمی ، نشاندهنده قطبی بودن آن مولکول است ، مثل مولکول های هیدروژن هالید (HX) ، کربن مونوکسید و.....



اگر در نقشه پتانسیل الکتریکی مولکول چند اتمی با اتم های مجاور یکسان ، اتم یا اتم های مرکزی در بین اتم های مجاور ، اصطلاحاً به دام افتاده باشد ، مولکول ناقطبی است ، چون یک سر مثبت و یک سر منفی نخواهد داشت و به عبارتی در چنین وضعیتی تراکم الکترون ها روی اتم یا اتم های مرکزی یکنواخت خواهد بود.

☆ مولکول های سه اتمی که شکل هندسی آنها در نقشه پتانسیل ، خطی باشد . مشابه : CO_2



☆ مولکول های دویا چند مرکزی با اتم ها یا گروه های مجاور یکسان که شکل هندسی آنها در نقشه پتانسیل خطی باشد . مشابه : اتین ، اتن ، اتان ، پروپان و ...

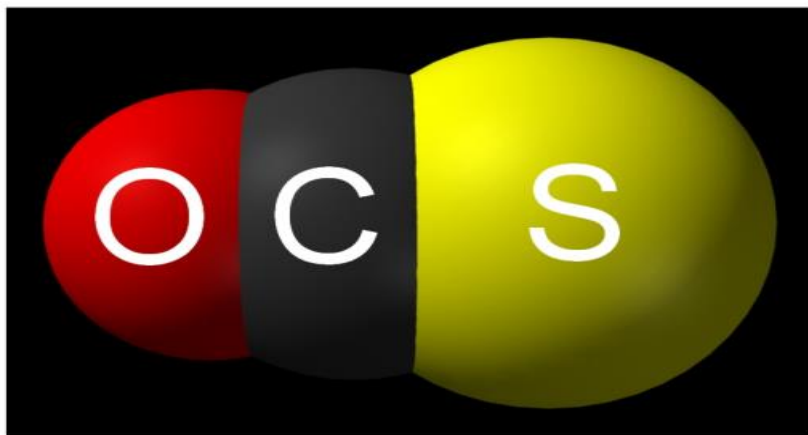


اگر در نقشه پتانسیل الکتریکی مولکول چند اتمی با اتم های مجاور یکسان ، اتم یا اتم های مرکزی در بین اتم های مجاور ، اصطلاحاً به دام نیفتاده باشد ، مولکول قطبی است . در چنین مولکولی زائده ای از اتم مرکزی دیده می شود که رنگ این زائده با رنگ ناحیه اتم های مجاور یکسان نیست و در نتیجه براحتی می توان تشخیص داد که تراکم بار الکتریکی در اطراف اتم مرکزی چنین مولکولی ، یکنواخت نیست و مولکول دارای دونا حیه مشخص با رنگ های مختلف است که سمت رنگ قرمز که تراکم بار الکتریکی بیشتر است ،

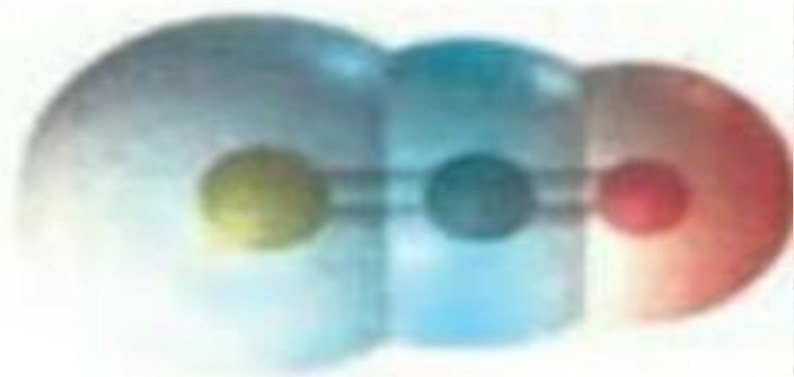


آمونیاک

برای مولکول های چنداتمی با اتم های مجاور غیر یکسان کافیتست بفهمیم که در نقشه پتانسیل این مولکول چند اتمی ، اندازه و رنگ اتم های مجاور یکسان نیست ، که ناشی از یکسان نبودن نوع و در نتیجه شعاع اتمی و اندازه متفاوت و در نتیجه خصلت نافلزی متفاوت ، اتم های مجاور است. پس مسلما تراکم بار الکتریکی در اطراف اتم مرکزی چنین مولکول هایی ، یکنواخت نخواهد بود ، که این عدم یکنواختی با توجه به یکسان نبودن رنگ ها در محدوده اتم های مجاور به راحتی ، قابل توجیه است.



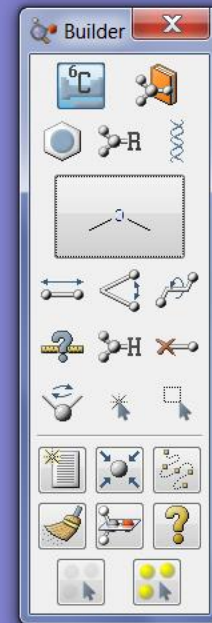
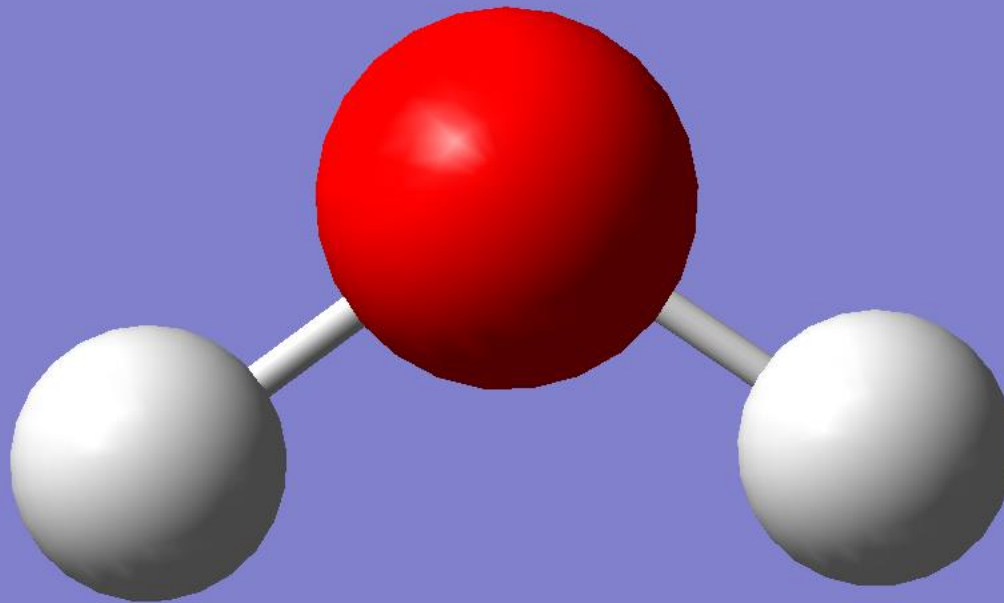
COS



کربونیل سولفید

نقشه چگالی الکترونی

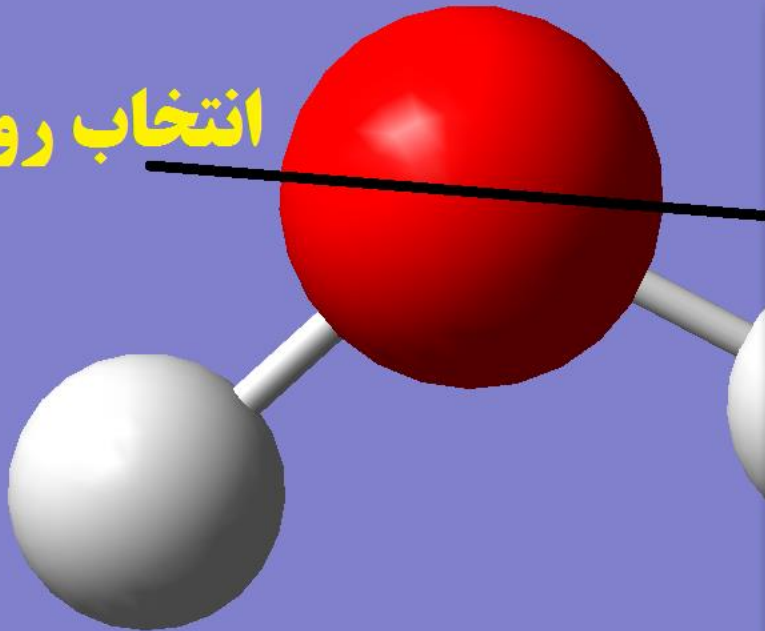
مرحله ۱: رسم مولکول مورد نظر



نقشه چگالی الکترونی

مرحله ۲ انتخاب روش و نوع محاسبات و شروع محاسبات

انتخاب روش محاسبات



شروع محاسبات

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title:

Keywords: # opt freq hf/3-21g geom=connectivity

Charge/Mult: 0 1

Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	NB
Opt-Freq						

Optimize to a: Minimum Use RFO step

Calculate Force Constants: Never Use tight conver

Compute Raman: Default Compute VCD

Compute ROA: No Read Incident Light I

Select Normal Modes Modes:

Anharmonic Corrections Specify Anharmonic Modes:

Additional Keywords:

Scheme: (Unnamed Scheme)

Submit... Quick Launch Cancel Edit..

نقشه چگالی الکترونی

GaussView 5.0.8

File Edit View Calculate Results Windows Help

Oxygen Tetravalent(S-S-LP-LP)

Builder Fragment

G1:M1:V1 - Save File

Look in: Desktop

Recent Places: Desktop, Libraries, Computer, Network

Libraries System Folder

Computer System Folder

chemdraw2016 File folder

foroghi File folder

green chem File folder

PowerPoint presenting File folder

r System Folder

Network System Folder

format power File folder

Gaussian File folder

L2TP File folder

text File folder

File name: b12

Files of type: Gaussian Input Files (*.gif*.com)

Save as: Auto

Write Cartesians Append Extra Input New Molecule Group

Builder

مرحله ۳

انتخاب یک نام برای فایل خروجی

نقشه چگالی الکترونی

The screenshot displays the Gaussian 09 software interface. The main window shows the output of a calculation, with the status "Processing Complete." and a message: "Gaussian job has completed. Do you want to close the Gaussian window?". A red arrow points from the "Yes" button in the dialog box to the Persian text "تایید پایان محاسبات" (Confirmation of calculation completion) at the bottom. The interface includes a menu bar (File, Process, Utilities, View, Help), a toolbar, and a status bar. The output window contains the following text:

```
ctivity||Title Card Required||0,1|0,0,0.53550639,0.97206052,0.1H,0,1.4  
9550639,0.97206052,0.1H,0,0.2150518,1.87699635,0.||Version=IA32W-G09Re  
va.02|State=1-A1|HF=-75.58581|RMSD=4.021e-010|Dipole=0.5352717,0.75739  
19,0.1|Quadrupole=0.7250546,0.2241802,0.8492218,0.7072128,0.0,0.1DC=C0  
2U [C2(01),SGU(H2)]||1E
```

I FIND THAT THE THREE TRULY GREAT
ARE WHEN I AM STANDING IN THE SH

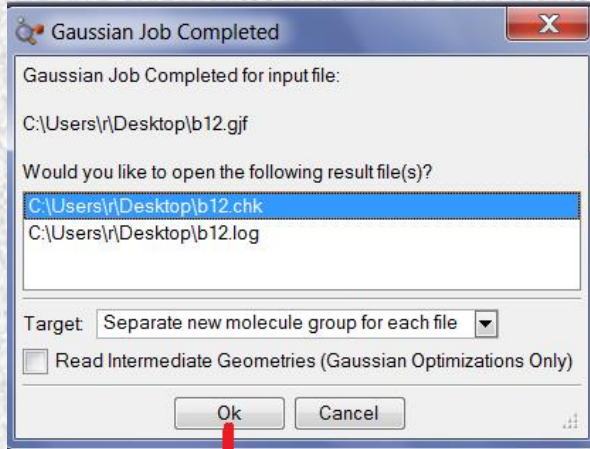
Job cpu time: 0 days 0 hours
File lengths (MBytes): RWF=
Normal termination of Gaussian 09

Finalizing Calculation and Output

مرحله ۴

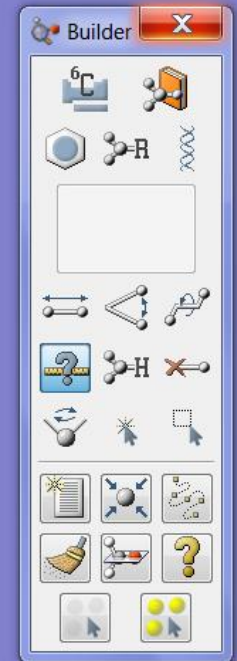
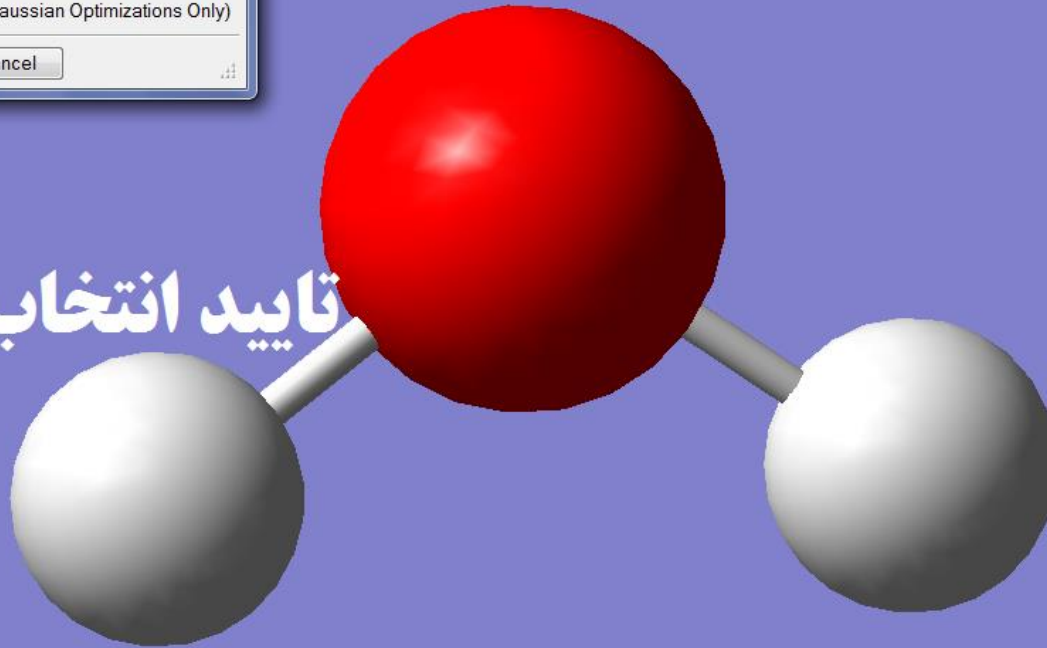
تایید پایان محاسبات

نقشه چگالی الکترونی



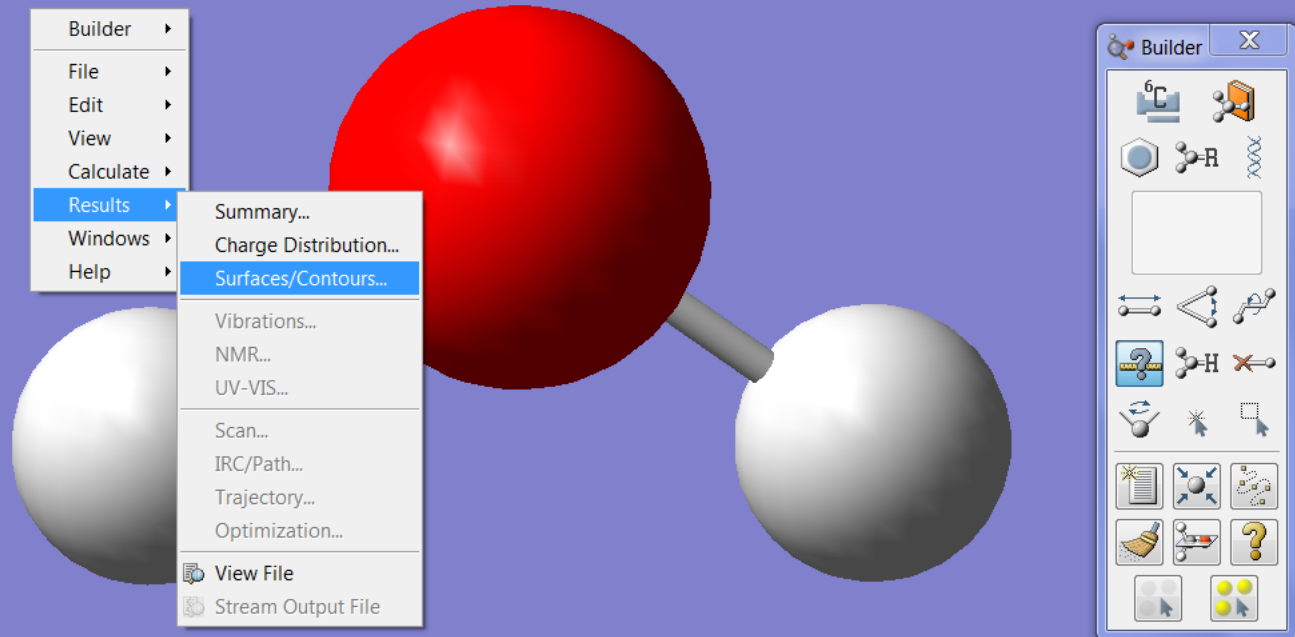
مرحله ۵

تایید انتخاب خروجی
chk



نقشه چگالی الکترونی

مرحله ۶

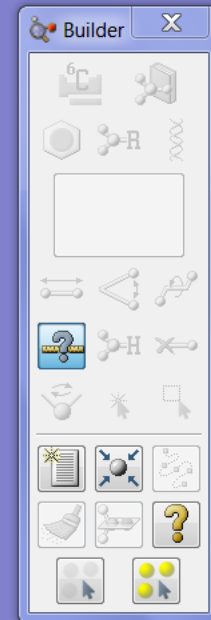
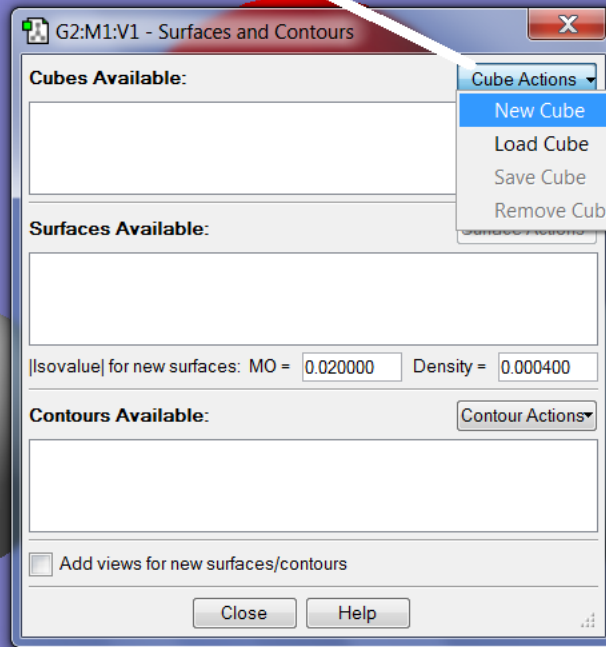


کلیک راست در صفحه و انتخاب گزینه Surfaces

نقشه چگالی الکترونی

New Cube انتخاب گزینه

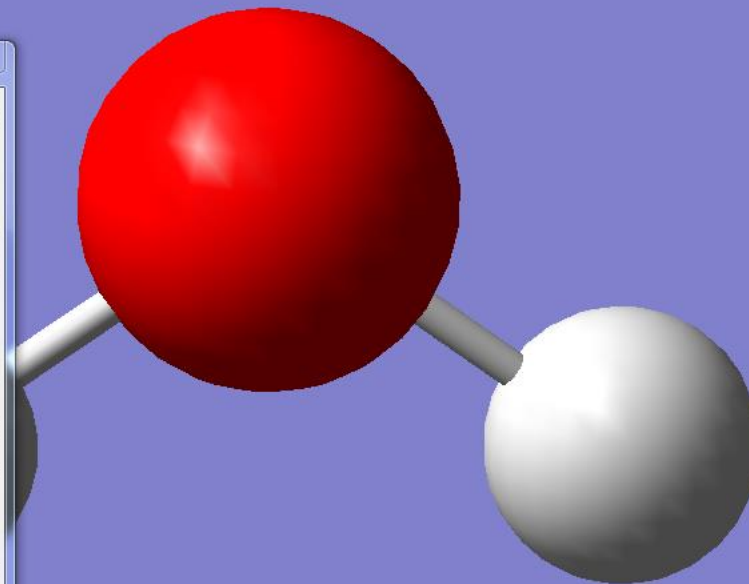
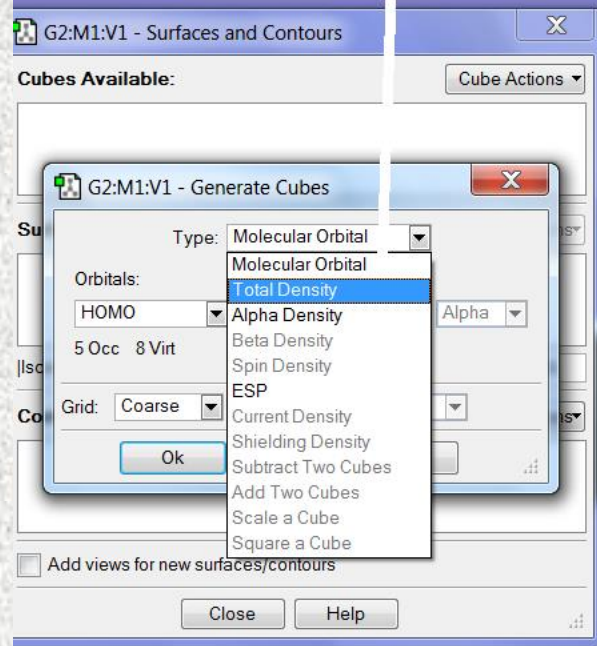
مرحله ۷



نقشه چگالی الکترونی

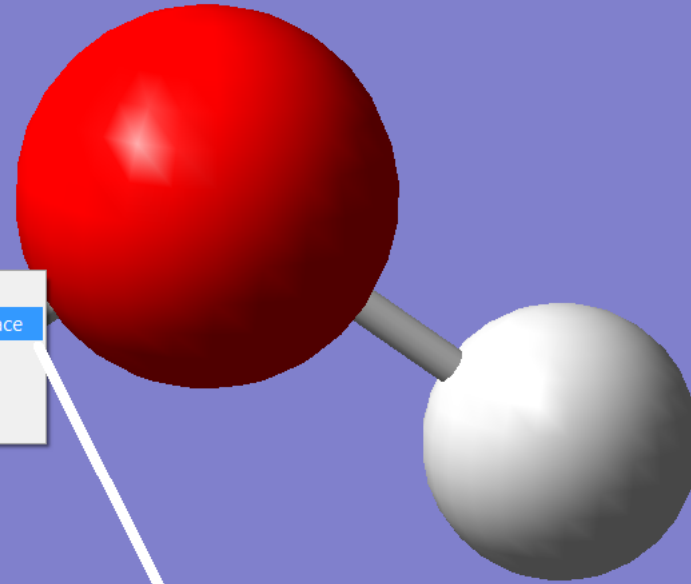
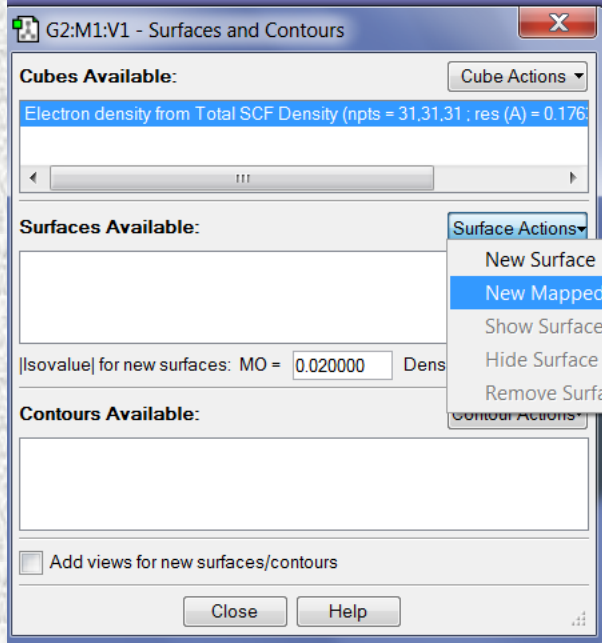
انتخاب Total Density

مرحله ۸



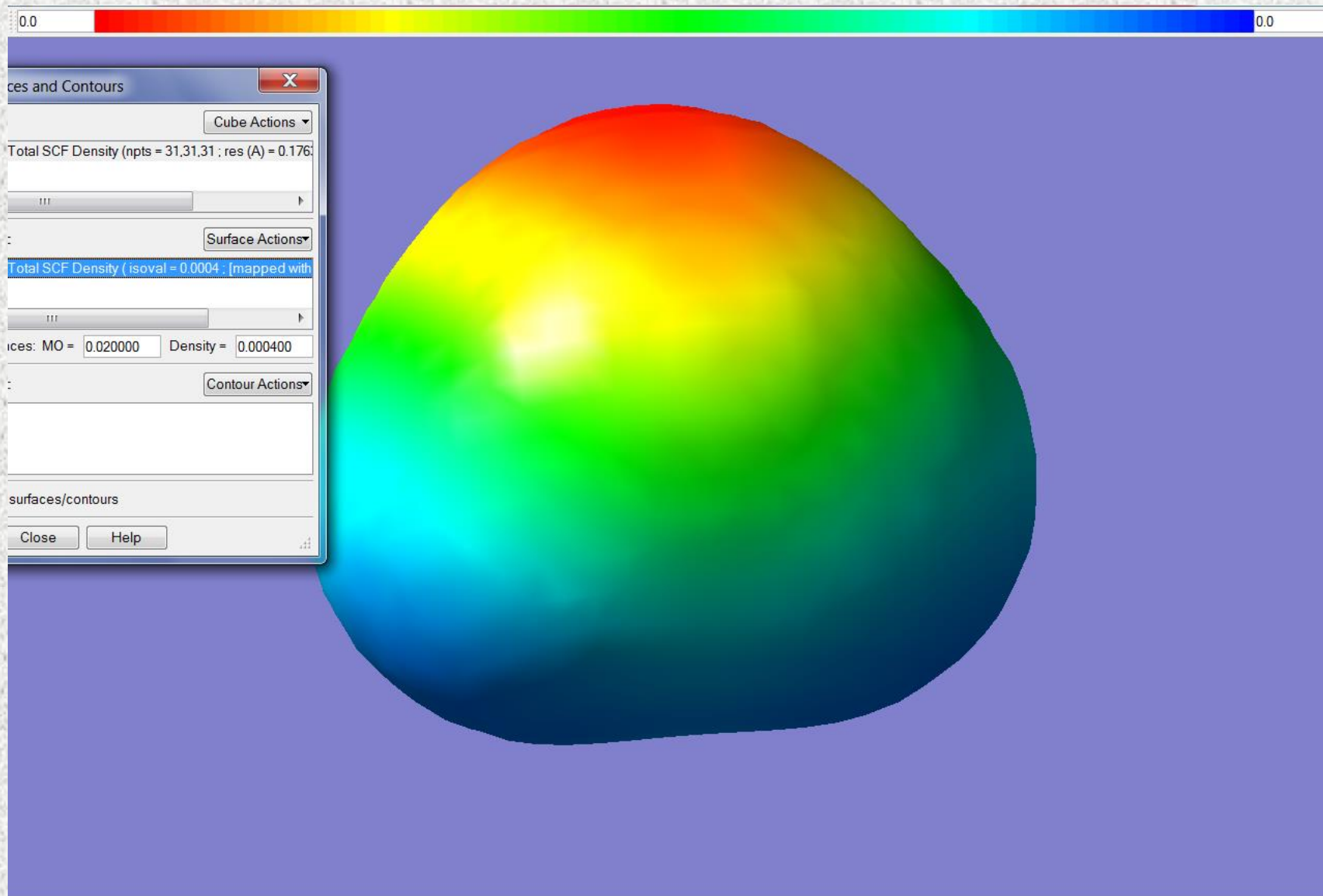
نقشه چگالی الکترونی

مرحله ۹



انتخاب New Mapped

نقشه چگالی الکترونی

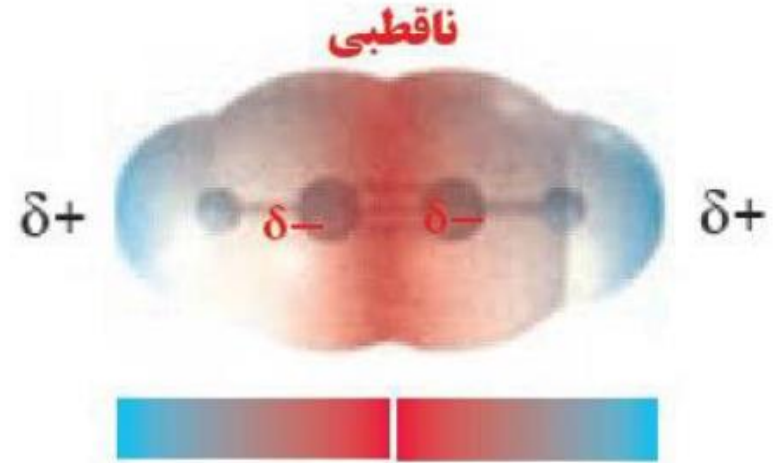


قطبیت مولکولی



کربونیل سولفید

توزیع بار نامتقارن



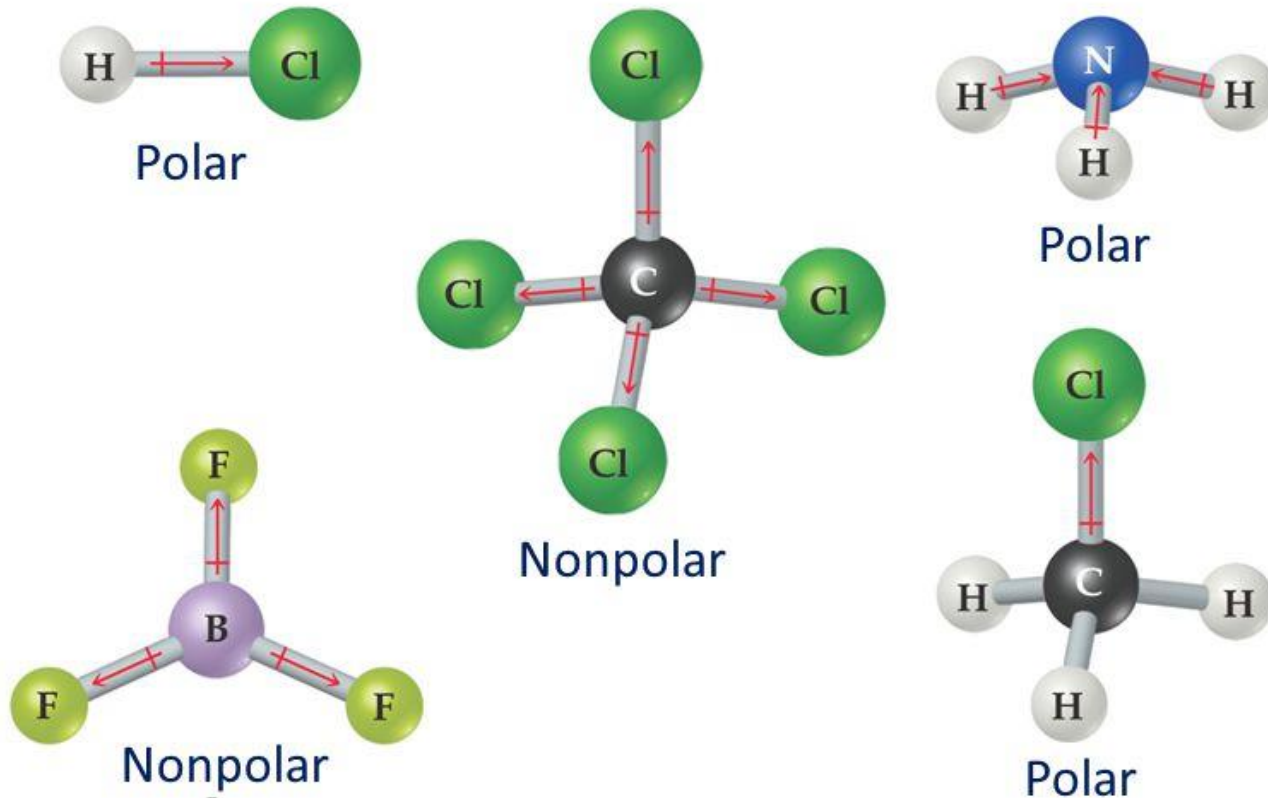
اتین

توزیع بار متقارن

قطبیت مولکولی

Molecular Shape and Molecular Polarity

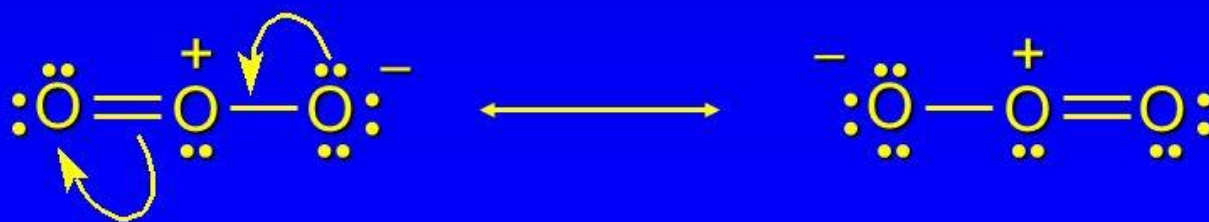
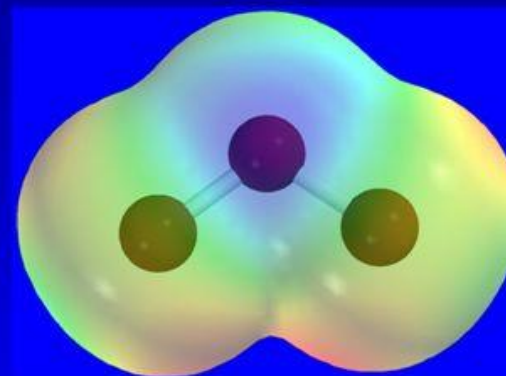
Fig 9.13 Molecules containing polar bonds



قطبیت مولکولی

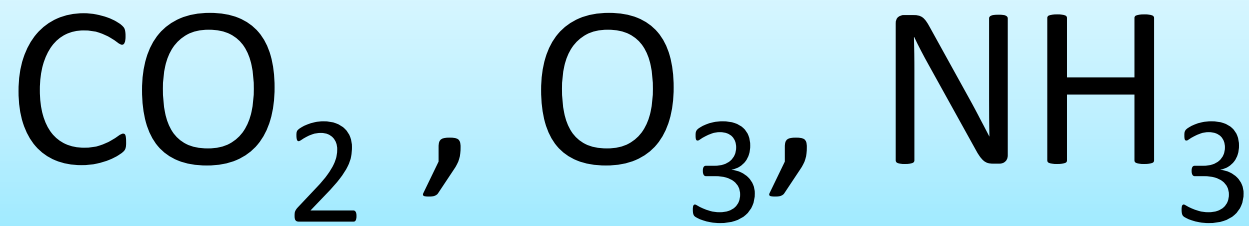
Ozone (O_3)

Electrostatic potential map shows both end oxygens are equivalent with respect to negative charge. Middle atom is positive.



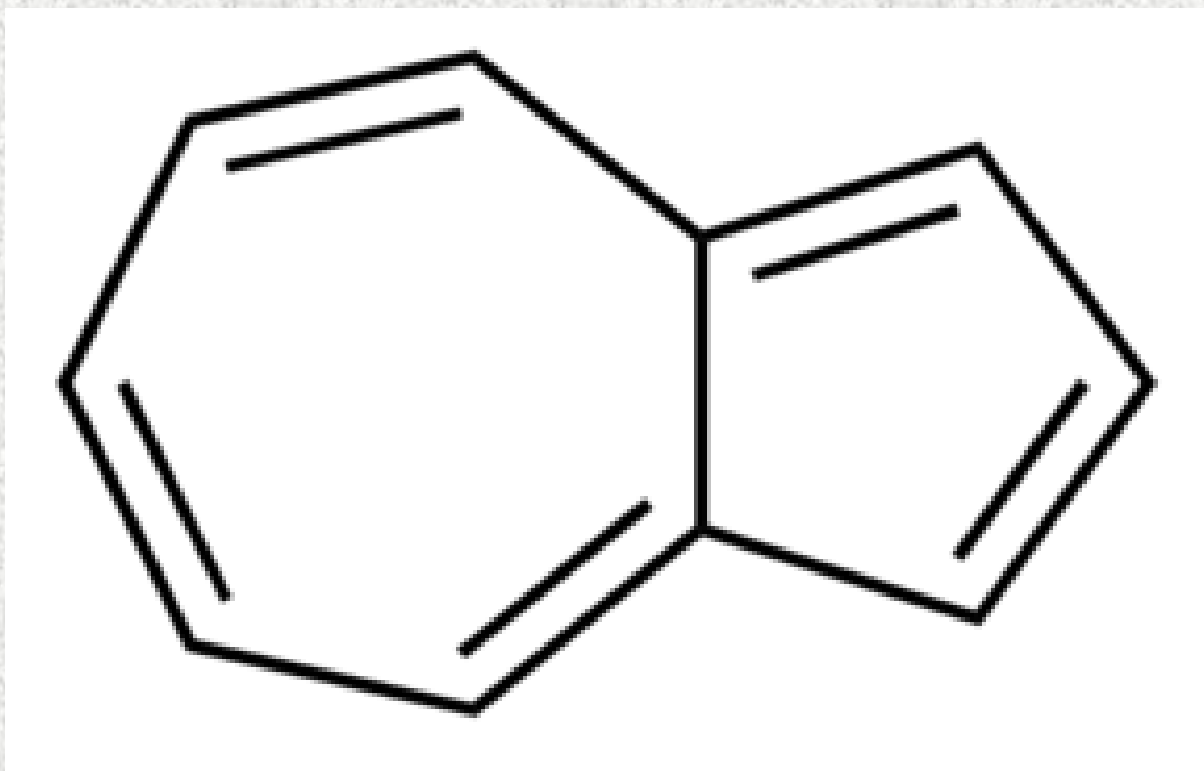
تمرین

نقشه پتانسیل مولکول های زیر رسم شود



تمرین

تعیین قطبی یا غیر قطبی بودن آزولن (C₁₀H₈) با رسم نقشه پتانسیل

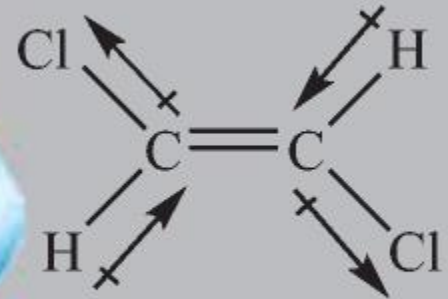
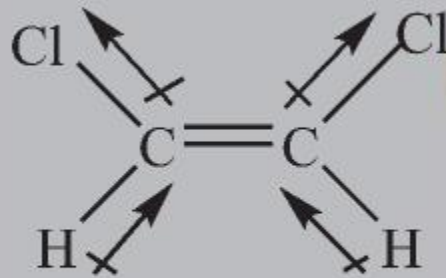


تمرین

تعیین قطبی یا غیر قطبی بودن ترانس و سیس
۱،۲دی کلرواتیلن با رسم نقشه پتانسیل



ث) سیس ۱،۲-دی کلرواتیلن قطبی است.

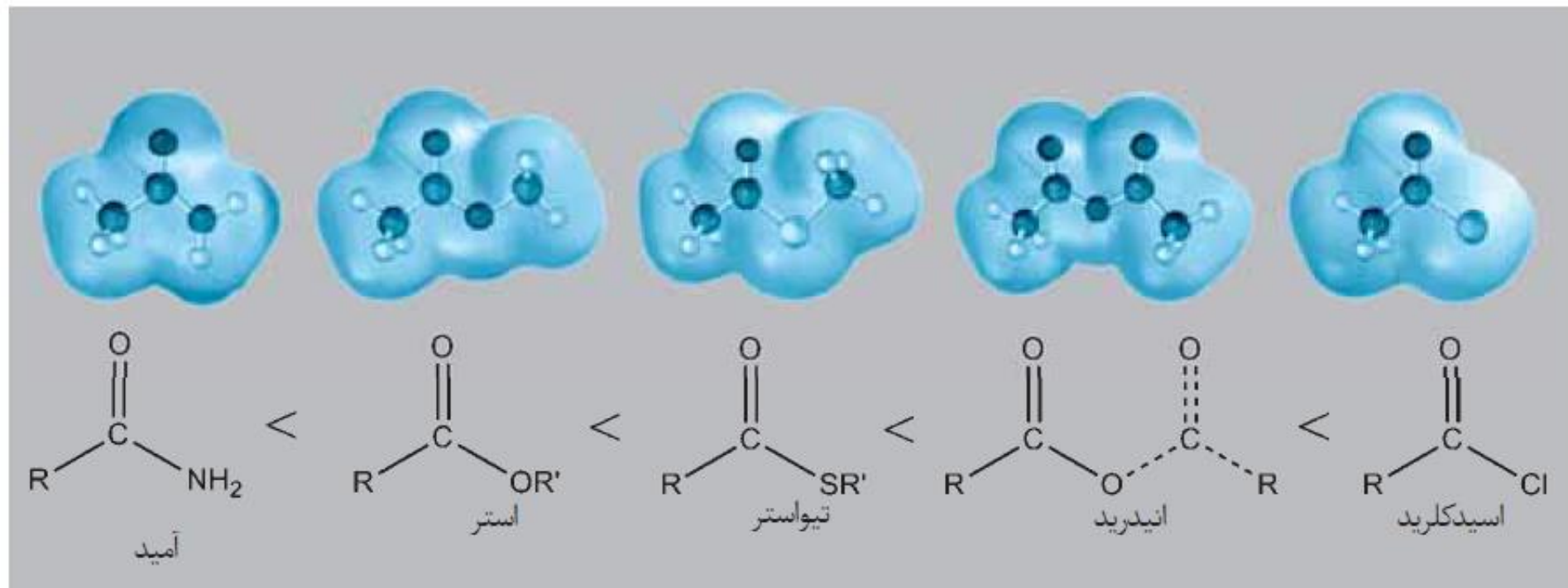


ث) ترانس ۱،۲-دی کلرواتیلن ناقطبی است.

شکل ۲

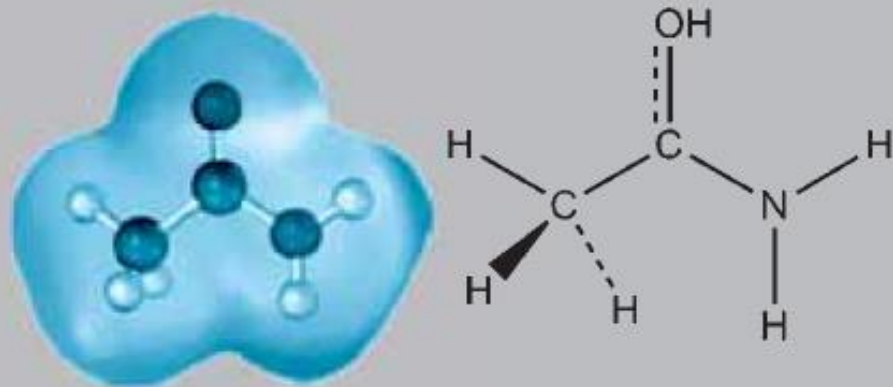
تعیین واکنش پذیری

آمید، استر، تیو استر، انیدرید و اسیل کلریدها از مشتقات اسیدها به شمار می‌روند. اگر بخواهیم سرعت این ترکیب‌ها را در واکنش‌های جاننشینی هسته‌دوستی با هم مقایسه کنیم، نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی راهگشا هستند. بنا به نقشه‌های این ترکیب‌ها، تمرکز بار مثبت روی گروه کربونیل در اسیل کلریدها بیشتر از بقیه مشتقات یادشده است. شکل ۶، ترتیب افزایش میزان بار مثبت گروه کربونیل و واکنش‌پذیری این مشتقات را نسبت به هم نشان می‌دهد.

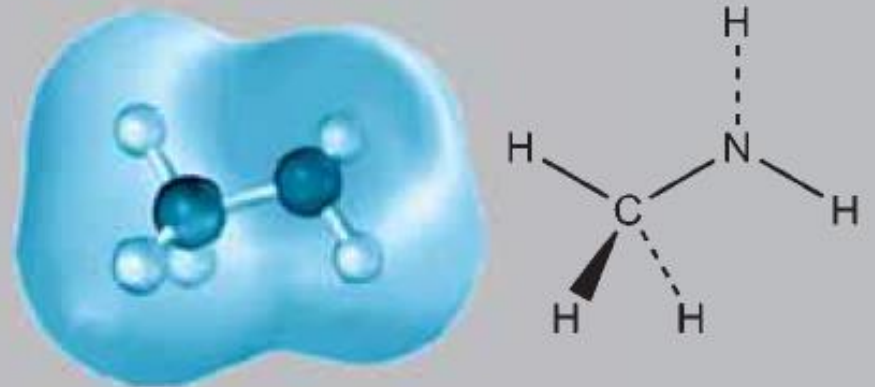


مقایسه قدرت اسیدی و بازی

بنا به نظریه لوویس، معیار تعیین قدرت اسیدی و بازی، میزان توانایی گرفتن یا از دست دادن الکترون است؛ هرچه توانایی یا تمایل به از دست دادن الکترون بیشتر باشد، قدرت بازی بیشتر است. به کمک نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی می‌توان مشخص کرد که تراکم الکترونی روی کدام اتم یا ترکیب بیشتر است پس قدرت اسیدی و بازی ترکیب‌ها نسبت به هم مشخص می‌شود. اگر در دو ترکیب، اتم‌هایی که الکترون آزاد دارند یکسان باشند، ترکیبی که در آن تراکم ابرالکترونی روی این اتم بیشتر است، قدرت بازی بیشتری دارد. برای نمونه، به نقشه‌های متیل‌آمین و استامید توجه می‌کنیم، شکل ۷.



استامید



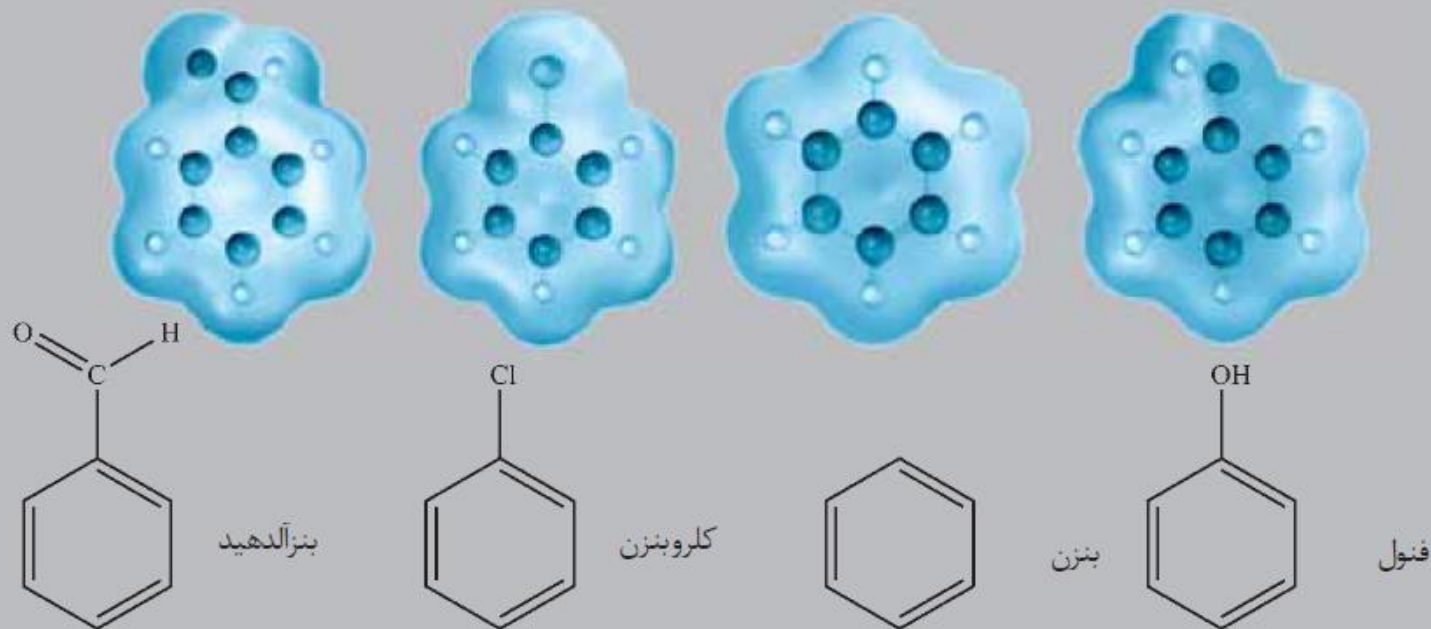
متیل آمین

شکل ۷

در متیل آمین، اتم N نسبت به اتم‌های دیگر، دارای بار منفی بیشتری است اما در استامید، تراکم بار روی N از بقیه اتم‌های این ترکیب کمتر است و مشاهده می‌شود که اتم O از بار منفی بیشتری برخوردار است. پس قدرت بازی متیل آمین از استامید بیشتر است.

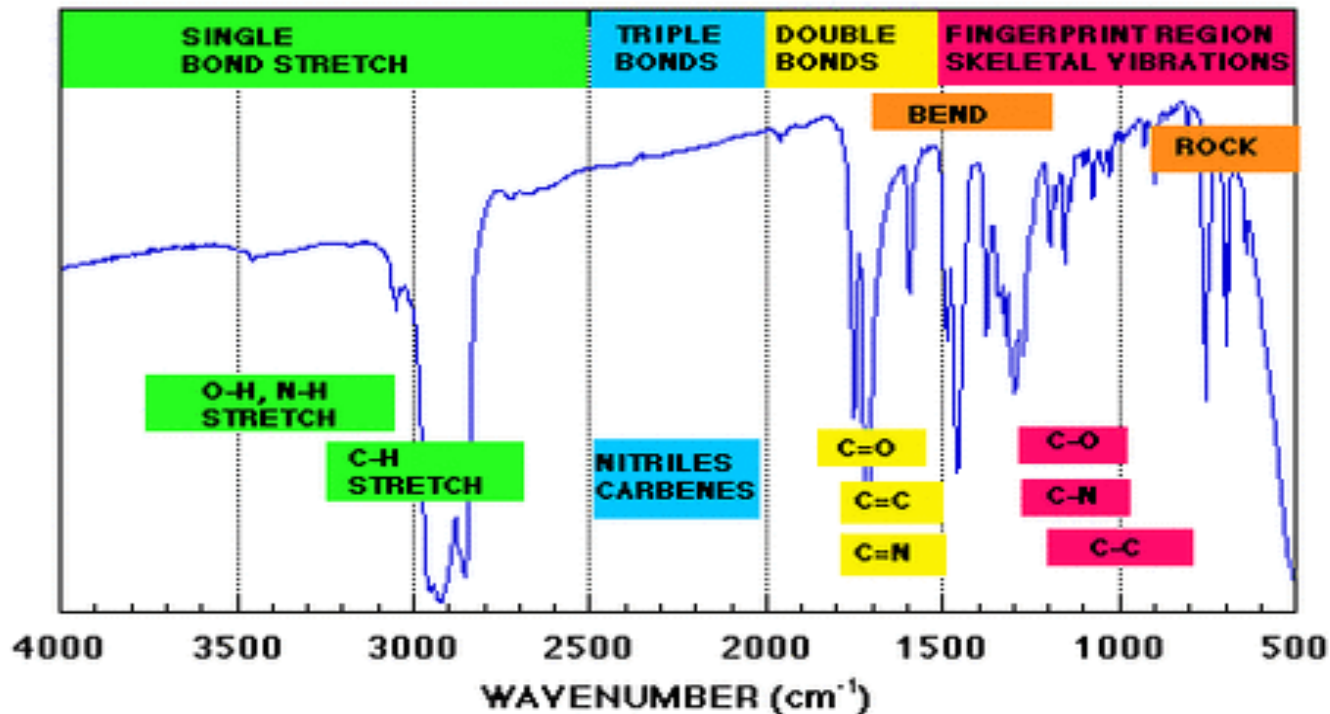
تشخیص گروه استخلافی الکترون دهنده یا کشنده

گروه‌های متصل به حلقه بنزن، بنا به خاصیت الکترون‌دهندگی القایی و رزونانسی می‌توانند چگالی بار الکتریکی و در نتیجه واکنش‌پذیری حلقه را تغییر دهند. برای نمونه، فعالیت حلقه بنزن در فنول، کلروبنزن، بنزالدهید و بنزن با هم تفاوت دارد. بنا به نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی این ترکیب‌ها، حلقه بنزن در فنول به رنگ سرخ دیده می‌شود یعنی چگالی بار الکتریکی آن از بقیه ترکیب‌های یادشده بیشتر است. در کلروبنزن و بنزالدهید رنگ حلقه در نقشه، زرد است و نشان می‌دهد که تراکم بار الکتریکی روی حلقه بنزن در این ترکیب‌ها از فنول کمتر است.



طیف سنجی مادون قرمز

مولکولها در اثر جذب نور ناحیه زیر قرمز تغییراتی در سطوح چرخشی و ارتعاشی خواهند داشت. حرکات ارتعاشی در مولکول به صورت چرخشی، خمشی و کشش وجود دارد که تحت تاثیر امواج با انرژی کم تغییر ممان دو قطبی داده و موجب ایجاد باندهایی در IR می شود. اساس IR امان دی پل و قطبیت گروه عاملی می باشد



طيف سنجي مادون قرمز

The image shows the GaussView 5.0.8 software interface. The title bar reads "GaussView 5.0.8". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Calculate", "Results", "Windows", and "Help". The "Results" menu is open, displaying the following options: "Summary...", "Charge Distribution...", "Surfaces/Contours...", "Vibrations..." (highlighted in blue), "NMR...", "UV-VIS...", "Scan...", "IRC/Path...", "Trajectory...", "Optimization...", "View File", and "Stream Output File". The main window area is mostly blank, with a toolbar at the top containing various icons for file operations and viewing. Below the main window, a "Vibrations" panel is visible, featuring a "Spectrum" table on the left and a large empty plot area on the right. At the bottom of the panel, there are controls for "Animate Vibration:" with a "Start Animation" button and a "Save Movie..." dropdown, and "Animation Frequency:" with a slider.

File Edit View Calculate Results Windows Help

Summary...
Charge Distribution...
Surfaces/Contours...
Vibrations...
NMR...
UV-VIS...
Scan...
IRC/Path...
Trajectory...
Optimization...
View File
Stream Output File

Vibrations

Spectrum

Animate Vibration: Start Animation Save Movie...
Animation Frequency:

طیف سنجی مادون قرمز

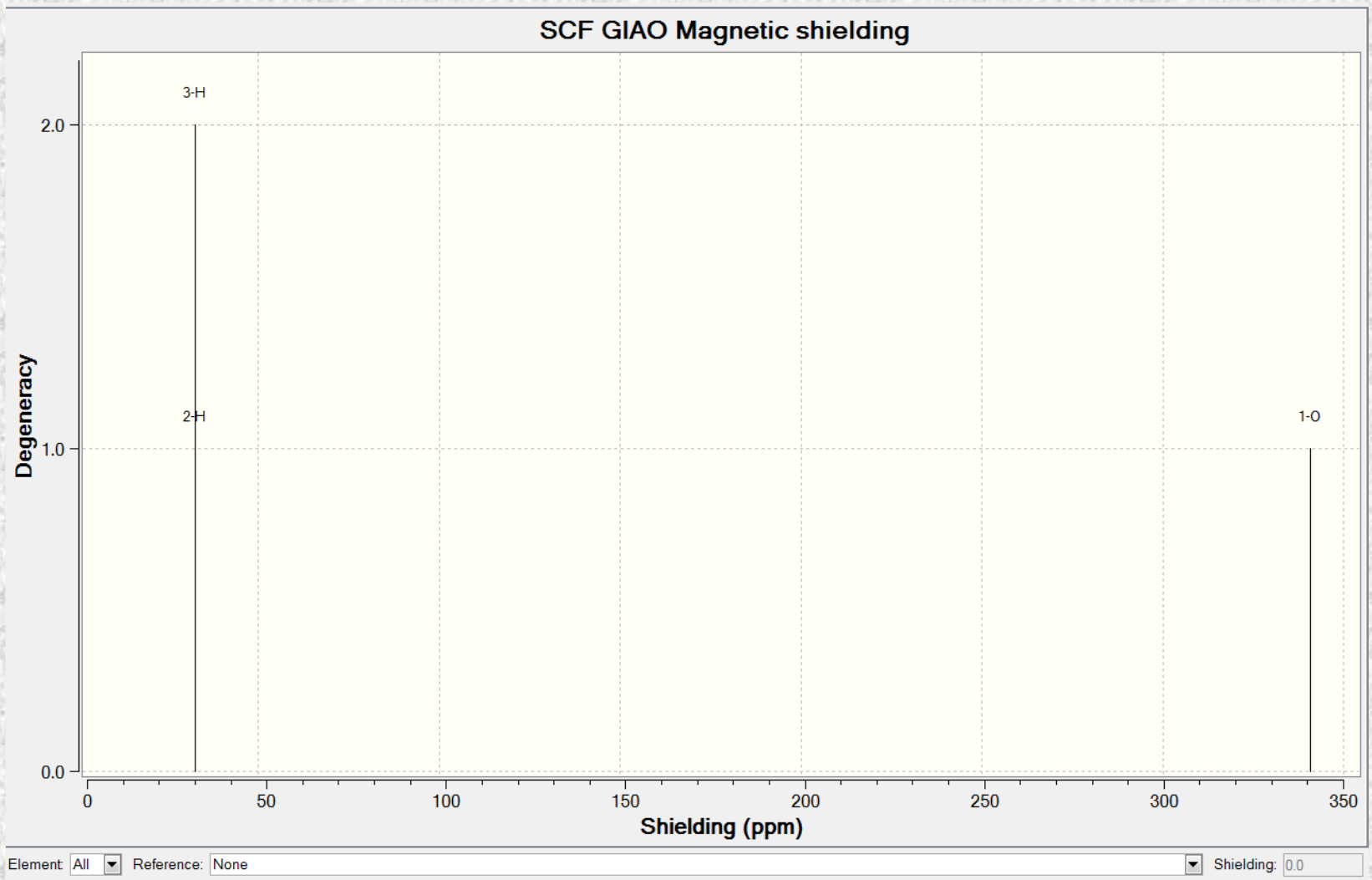
در این بخش می توانیم انواع ارتعاشات را بصورت انیمیشن دیده و حتی طیف های ارتعاشی و رامان ملکول مورد نظر را مشاهده کنیم.

The screenshot shows two windows from the Gaussian software interface. The left window, titled "G1:M1:V1 - Display Vibrations", contains a table with the following data:

Mode #	Freq	Infrared	Raman Activity	Depolar-P	Depolar-U
1	659.01	65.3409	0.0000	0.0000	0.0000
2	659.01	65.3409	0.0000	0.0000	0.0000
3	1427.62	0.0000	10.8857	0.2141	0.0000
4	2463.51	729.4729	0.0000	0.0000	0.0000

The right window, titled "G1:M1:V1 - CO2 VIB.LOG (C:/Users/user/Desktop/CO2 VIB.LOG)", displays a 3D ball-and-stick model of a CO2 molecule. A context menu is open over the model, with the "Results" menu item selected, which has opened a sub-menu containing "View File" and "Stream Output File".

NMR



تمرین

طیف Raman, IR, NMR را برای مولکول
متان رسم و ذخیره فرمائید.

با تشکر از تمام همکاران محترم

گروه شیمی خراسان شمالی - زمستان ۱۴۰۰

مدرس: بهزاد پدیداران مقدم