اثر آنومری در تحلیل خواص ساختاری و صورتبندی هتروسیکلهای استخلاف شده توسط محاسبات مکانیک کوانتومی

www.ketab.ir

تالیف:

فاطمه آذرخشی

(عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد ورامین- پیشوا)

مهرنوش خالقیان

(عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد اسلامشهر)

سرشناسه		آذرخشی، فاطمه، ۱۳۵۸
عنوان و نام پدیدآور	:	اثر آنومری در تحلیل خواص ساختاری و صورتبندی هتروسیکلهای استخلاف شده توسط محاسبات مکانیک کوانتومی
مشخصات نشر	:	تهران، کتاب آوا، ۱۴۰۰
مشخصات ظاهری	:	۱۶۹ ص
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۳۴۶-۶۰۰-۸
وضعیت فهرست نویسی	:	فیپا
شناسه افزوده	:	خالقیان، مهرنوش، ۱۳۵۸
موضوع	:	شیمی کوانتوم Quantum chemistry
موضوع	:	محاسبات کوانتومی Quantum computing
موضوع	:	کوانتوم Quantum theory
موضوع	:	شیمی فضایی Stereochemistry
رده بندی کنگره		QD۴۶۴
رده بندی دیویی	:	۵۴۱/۲۸
شماره کتابشناسی ملی	:	۷۵۴۷۴۱۲

اثر آنومری در تحلیل خواص ساختاری و صورتبندی هتروسیکلهای استخلاف شده توسط محاسبات مکانیک کوانتومی

انتشارات کتاب آوا

مؤلفان:	دکتر فاطمه آذرخشی – دکتر مهرنوش خالقیان
ناشر:	کتاب آوا
نوبت چاپ:	اول -تابستان ۱۴۰۰
شمارگان:	۵۰ نسخه
قیمت:	۴۰،۰۰۰ تومان
شابک:	۹۷۸-۶۰۰-۳۴۶-۶۰۰-۸

نشانی دفتر مرکزی: انقلاب، خیابان ۱۲ فروردین، بن‌بست حقیقت، پلاک ۴، طبقه ۲، واحد ۴

شماره‌های تماس: ۶۶۹۷۴۶۴۵ | ۶۶۹۷۴۱۳۰ | ۶۶۴۰۷۹۹۳ | دورنگار: ۶۶۴۶۱۱۵۸

www.avabook.com avabook_kazemi@yahoo.com

فروشگاه کتاب آوا: اسلام‌شهر، خیابان صیاد شیرازی (خیابان دانشگاه) جنب فرمانداری

تلفن: ۵۶۳۵۴۶۵۱

هرگونه تکثیر این اثر از طریق ارسال یا بارگذاری فایل الکترونیکی، یا چاپ و نشر کاغذی آن بدون مجوز ناشر، به هر شکل، اعم از فایل، سی‌دی، افست، ریسوگراف فتوکپی، زیراکس یا وسایل مشابه، به صورت متن کامل یا صفحاتی از آن، تحت هر نام اعم از کتاب، راهنما، جزوه، یا وسیله کمک آموزشی، در فضای واقعی یا مجازی، و همچنین توزیع، فروش، عرضه یا ارسال اثری که بدون مجوز ناشر تولید شده، موجب پیگرد قانونی است.

www.ketab.ir

عنوان	صفحه

فصل اول: مقدمه ای بر اثر آنومری

۱-۱ مقدمه ۱

فصل دوم: مروری بر اثرات استریوالکترونی

۲-۱- مقدمه ۸

۲-۲- صورتبندی در مولکول های غیر حلقوی ۹

۲-۳- بررسی صورتبندی در مشتقات سیکلوهگزان ۱۲

۲-۴- تاریخچه اثر آنومری ۲۳

۲-۵- توجیه اثر آنومری ۲۳

۲-۶- اثر آنومری اگزو و واندو ۳۰

۲-۷- مطالعات انجام شده بر روی اثر آنومری در ترکیبات مختلف ۳۱

۲-۸- اثر آنومری در ۳،۱-دی‌اکسان‌های استخلاف شده در موقعیت (۵) ۳۲

۲-۹- اثر آنومری در ۳،۱-دی‌تیان‌های استخلاف شده در موقعیت (۵) ۳۳

۲-۱۰- اثر آنومری در ۴،۱-دی‌هتروسیکلوهگزان با استخلاف در موقعیت (۲) ۳۳

۲-۱۱- اثر آنومری در ۳،۱-دی‌تیان‌های استخلاف شده در موقعیت (۲) ۳۴

۲-۱۲- اثر هترواتم ها بر تعادل صورتبندی ها ۴۱

۲-۱۳- بررسی نقش اثر آنومری بر ارجحیت صورتبندی ها ۴۵

فصل سوم: شیمی محاسباتی، محاسبات مکانیک مولکولی و مکانیک کوانتومی

۳-۱- مقدمه ۵۱

۳-۲- شیمی محاسباتی ۵۳

۳-۳- روش دینامیک مولکولی ۵۶

www.ketab.ir

۳-۴- روش شبیه سازی مونت کارلو ۵۸
۳-۵- مکانیک مولکولی ۶۰
۳-۵-۱- روش های محاسباتی مکانیک مولکولی ۶۱
۳-۵-۱-۱- محدودیت های روش محاسبات مکانیک مولکولی ۶۶
۳-۶- مکانیک کوانتومی ۶۶
۳-۶-۱- روش محاسباتی مکانیک کوانتومی ۶۸
۳-۶-۲- روش های نیمه تجربی ۷۰
۳-۶-۳- روش‌های آغازین ۷۲
۳-۷- تقریب بورن- اپنهایمر ۷۴
۳-۸- روش میدان خودسازگار و تقریب هارتری- فاک ۷۶
۳-۹- روش‌های مبتنی بر اوربیتال مولکولی ۸۴
۳-۹-۱- روش هارتری- فاک ۸۴
۳-۹-۱-۱- محدودیت‌های روش هارتری- فاک ۸۵
۳-۹-۲- روش فوق هارتری— فاک (روش های همبستگی الکترون) ۸۶
۳-۹-۲-۱- روشهای همبستگی وردشی ۸۷
۳-۹-۲-۲- تئوری همبستگی اختلال ۸۸
۳-۹-۲-۳- روش همبستگی تابع دانسیته (تئوری تابعیت چگالی DFT) ۹۰
۳-۱۰- سری های پایه ۹۱
۳-۱۰-۱- اوربیتال های اسلیتری و گوسی ۹۲
۳-۱۰-۲- طبقه‌بندی سری‌های پایه ۹۴
۳-۱۰-۲-۱- سری های پایه حداقل (کمینه) ۹۶
۳-۱۰-۲-۲- سری‌های پایه پاپل ۹۷
۳-۱۰-۲-۳- توابع پلاریزه کننده و پخش کننده ۹۹
۳-۱۰-۲-۴- سری های پایه دوتایی زتا ۹۹

www.ketab.ir