

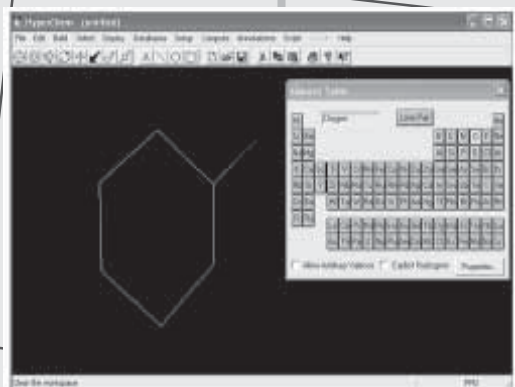
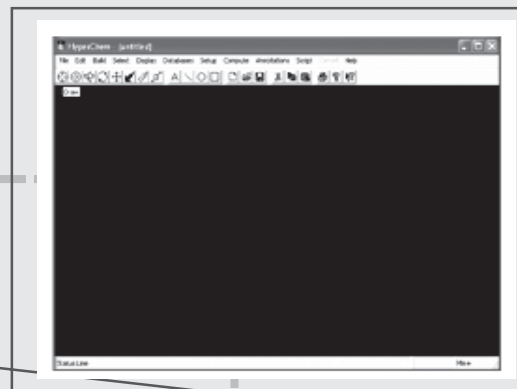
نرم افزار Hyper Chem

ناهدی رجبی

دبیر شیمی منطقه برخوردار اصفهان

یکی از نرم افزارهای مفید در شیمی، «HyperChem» است. با این نرم افزار می توان مولکول های ساده را به راحتی بهینه کرد و طول پیوندها، زوایای پیوندی و زوایای پیچشی، انرژی درونی و گرمای تشکیل، و... را به دست آورد. این برنامه از روش های «نیمه تجربی»^(۱) شامل CNDO، MNDO، PM3، AM1، و روش های محاسباتی «ab initio» (روش آغازین) استفاده می کند. هر کدام از روش های محاسباتی نیمه تجربی مزایا و معایبی دارد و ممکن است برای مثال، داده های یکی از روش های محاسباتی با داده های تجربی (داده های تجربی از طریق پراش اشعه ی x یا روش های تجربی دیگر به دست می آیند) یک مولکول مطابقت کند و یا برای یک مولکول دیگر، روش نیمه تجربی مطابقت بیشتری داشته باشد. عموماً همه ی این روش ها بر محاسبات مکانیک کوانتومی استوار هستند.

نرم افزار HyperChem کاربرد بسیار گسترده ای دارد. از جمله به کمک آن می توان در محاسبات شیمی فیزیکی و محاسباتی که در آن ها به سادگی انواع بسیاری از مولکول ها را که سنتز آن ها مشکل است، طراحی و پارامترهای مربوط به آن ها را، از جمله انرژی و... را محاسبه کرد.





ورود به نرم افزار

پس از نصب برنامه روی میزبان «HyperChem professional» در مسیر «start/All programs / HyperChem Release 7»


محیط نرم افزار


پنجره ی تصویر ۱، محیط نرم افزار را در بدو ورود به آن نشان می دهد. در این پنجره از بالا، نوار عنوان، نوار منو و نوار ابزار وجود دارد. دکمه های موجود در نوار ابزار امکان دسترسی به برخی دستورها را فراهم می کنند. با برخی از این ابزارها آشنا می شویم:

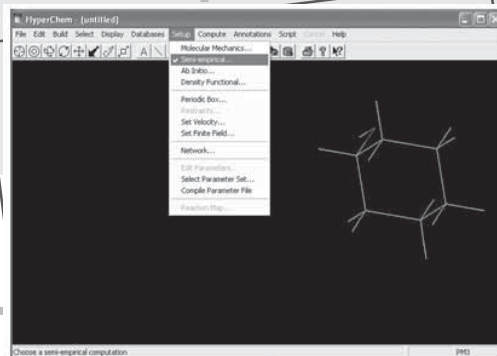
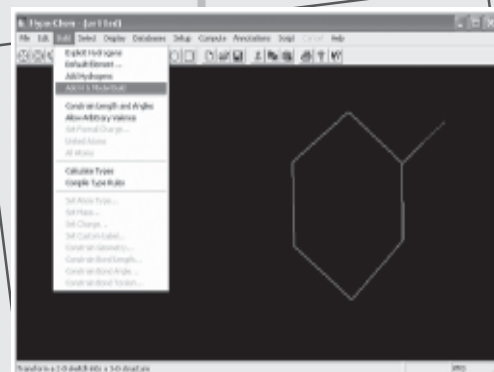
Draw : با دوبار کلیک چپ روی این ابزار، جدول تناوبی ظاهر می شود. عنصر مورد نظر را از جدول انتخاب و در صفحه ی سیاه رنگ پنجره قرار دهید.

Select : با این ابزار می توان عنصرهایی را که با ابزار **Draw** رسم کرده اید، انتخاب کنید. هم چنین برای حذف یک عنصر، ابتدا باید آن عنصر را به کمک این ابزار انتخاب و بعد با زدن کلید «Delete» آن را حذف کرد. برای خارج شدن از حالت انتخاب کافی است در جای خالی صفحه یک بار کلیک کنید.

Rotate out of plan : به کمک این ابزار مولکول رسم شده را در فضا بچرخانید.

Rotate in plan : این ابزار مولکول رسم شده را در صفحه می چرخاند.

Transfer : به کمک این ابزار می توان مولکول رسم شده را در صفحه ی نمایش جابه جا کرد.



انجام محاسبات نیمه تجربی

۱. ابتدا مولکول مورد نظر را با استفاده از جدول تناوبی موجود در نرم افزار (ابزار Draw) رسم کنید. به این صورت که اتم‌ها را از جدول کناری انتخاب و در زمینه‌ی سیاه پنجره قرار دهید. سپس با کشیدن خط، اتم‌ها را به یکدیگر پیوند دهید.
۲. از منوی «build» گزینه‌ی «Add H & model Build» را انتخاب کنید. در این حالت مولکول مورد نظر به صورت مسطح و حاوی تمام اتم‌های مولکول، نمایش داده می‌شود.
۳. از منوی «File» گزینه‌ی «start log»، اسم فایمل را برای ذخیره‌ی محاسبات انتخاب کنید.
۴. از منوی «Setup»، نوع روش محاسباتی را که یکی از روش‌های نیمه تجربی یا «ab initio» است، انتخاب کنید.
۵. از منوی «compute»، گزینه‌ی «Geometry optimization» را انتخاب کنید تا انجام محاسبات شروع شود.

توجه کنید که امکان دارد برای انجام موفقیت‌آمیز یک محاسبه، چندین بار کار محاسبه تکرار شود (پنج مرحله). زمانی که در پایین صفحه در نوار وضعیت جلوی کلمه‌ی «convergence» کلمه‌ی «yes» نوشته شود، محاسبه انجام شده است. در غیر این صورت و با مشاهده‌ی کلمه‌ی «No» جلوی convergence و توقف محاسبه، محاسبه باید دوباره تکرار شود (از مرحله‌ی ۳).

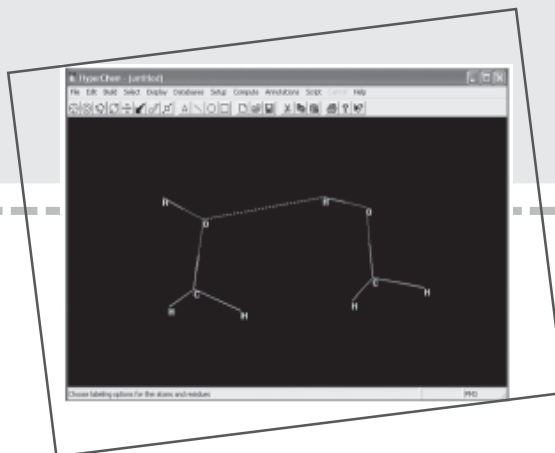
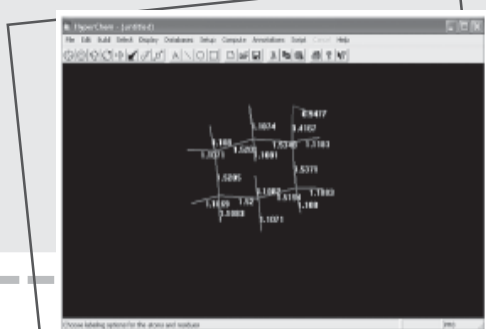
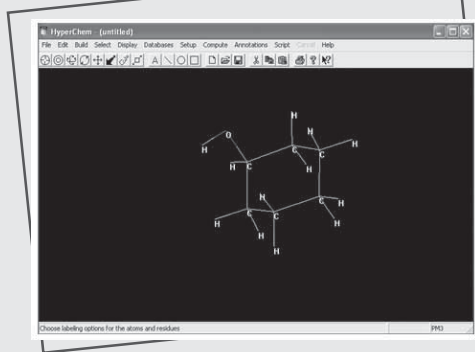
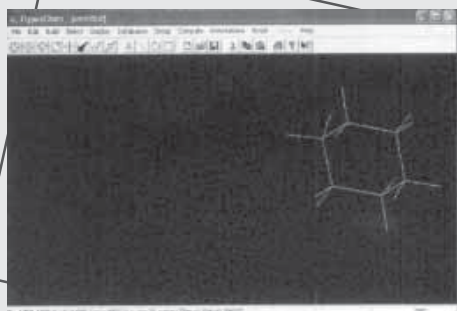
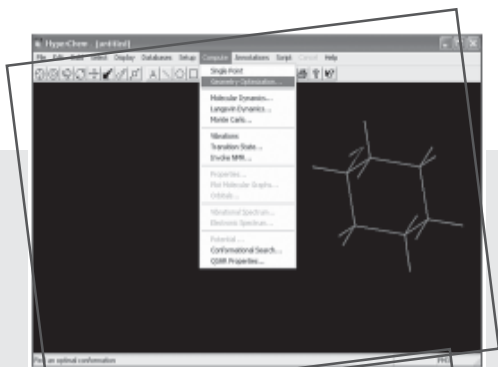
۶. پس از اتمام محاسبات، مجدداً به منوی «File» مراجعه و با انتخاب گزینه‌ی «Stoplog»، محاسبات انجام شده را «Save» کنید.

با انتخاب گزینه‌ی «Lable» از منوی «Display»، پنجره‌ای گشوده می‌شود که با انتخاب هر یک از گزینه‌های موجود در آن، می‌توان اطلاعات زیادی در مورد مولکول بهینه شده‌ی مورد نظر به دست آورد. با کلیک کردن دکمه‌ی «Ok»، این اطلاعات روی مولکول ثبت می‌شود.

با استفاده از منوی «Select» و انتخاب سه اتم متوالی (با ابزار Select) روی مولکول، می‌توان هر کدام از زوایای پیوندی مورد نظر را مشاهده کرد و یا با انتخاب چهار اتم متوالی با کلیک چپ، می‌توانیم زوایای پیچشی مورد نظر را ببینیم.

اگر مولکول مورد نظر دارای پیوند هیدروژنی درون مولکولی یا بین مولکولی باشد، با انتخاب گزینه‌ی «Recompute H bonds»، پیوند هیدروژنی به صورت خط چین نشان داده می‌شود. اطلاعات بیشتر در مورد نرم‌افزار در منوی «Help» با کلیک کردن گزینه‌ی «Glossary» به دست می‌آید. برای اطلاعات بیشتر به منابع زیر مراجعه کنید:

1. Doucet-weber, computer- Aided Molecular Design, Academic press, New York, 1997.
2. Leach R, Molecular Modelling Longman, Singapor, 1996.



وقتی زبان شیرین می شود

نرم افزار دیکشنری لانگمن

محمدرضا معینی / دانش آموز سال سوم دبیرستان منطقه ی ۱۲ تهران

سال دوم دبیرستان بود که معلم انگلیسی ما سر کلاس اعلام کرد، نسخه ی جدید «لغت نامه ی معاصر لانگمن»^۱ چاپ شده و خیلی خوب است و از این حرف ها . بعد هم گفت: «اگر کسی می خواهد، می تواند سفارش بدهد تا با تخفیف برایش بیاورم». من هم سفارش دادم و پس از چند روز، لغت نامه را به من تحویل دادند. به همراه لغت نامه، یک بسته لوح فشرده هم که حاوی نرم افزار لغت نامه بود، گرفتم.

ابتدا فکر می کردم، این نرم افزار چیزی شبیه بقیه ی لغت نامه های دیجیتالی است. اما وقتی آن را روی رایانه ام نصب کردم و نرم افزار اجرا شد، فوق تمام انتظاراتم بود! برای اولین بار در عمرم، چندین ساعت با رایانه ام با چیزی به جز بازی ها سرگرم بودم! نرم افزار آن قدر جذاب بود که گذشت زمان را حس نمی کردم. یکی از مهم ترین نقاط قوت این نرم افزار، طراحی ساده آن است؛ به شکلی که هر کسی با کمترین دانش رایانه ای می تواند، از اکثر قابلیت های آن استفاده کند.

نکته ی دیگر، کشش نرم افزار است. وقتی شما لغتی را وارد می کنید، نرم افزار لغات هم معنی و شبیه به آن لغت، اصطلاحات ساخته شده با آن لغت در زبان انگلیسی و از همه مهم تر، مثال های متنوعی را برای شما نمایش می دهد. و مهم تر آن که تمام این مثال ها از روزنامه ها، مجلات و کتاب های مشهور هستند! شما می توانید با کلیک روی هر یک از این موارد، وارد قسمت مربوط به آن لغت شوید و دوباره روز از نو، روزی از نو! این گونه بود که گاهی من در این نرم افزار غرق می شدم و ساعت ها مشغول لغت نامه گردی بودم. قسمت دیگر این نرم افزار، بخش «فعال کننده»^۲ است. من به شخصه این بخش را خیلی دوست دارم! در این بخش، هر لغتی را که وارد کنید، تمام لغات مربوط به آن را به همراه معنی و مثال آن برای شما فهرست می کند.

مثلاً اگر شما لغت «غذا» را وارد کنید، نرم افزار برای شما افعال مربوط به خوردن، انواع خوردنی ها و... را حاضر می کند! این بخش واقعاً نیازمند لغت نامه گردی به مدت چند ساعت است!

نرم افزار، بخش های دیگری نیز دارد که به اختصار از این قرارند:

● **بخش تمرین ها:** تمرین های زیادی به صورت چند رسانه ای برای دستور زبان (گرامر) و لغات در نظر گرفته شده اند. در این بخش چند آزمون برای IELTS و TOEFL نیز موجود است.

● **بخش گرامر:** در این بخش دستور زبان انگلیسی با زبان ساده توضیح داده شده است.

● **بخش طرح درس معلمان:** چون هنوز معلم نشده ام، این بخش دردی از من دوا

نمی کند، ولی با نگاه گذرایی که به آن داشته ام، احساس کرده ام که برای معلمان زبان بسیار قابل استفاده است. و چند نکته ی دیگر که بد نیست بدانید:

○ تمام لغت نامه ی لانگمن با هزار لغت نوشته شده است! یعنی متن بسیار ساده است.

○ این نرم افزار، با سیستم عامل «لینوکس» و «مکینتاش» هم کار می کند.

ناگفته نماند که لغت نامه شامل ۸۸ هزار تلفظ انگلیسی و آمریکایی است و این امکان جالب را دارد که شما می توانید صدای خود را ضبط کنید. نرم افزار آن را با تلفظ درست تطبیق می دهد و صحت تلفظ شما را تأیید یا رد می کند.

زیرنویس

1. Longman Dictionary of Contemporary English
2. Activator

