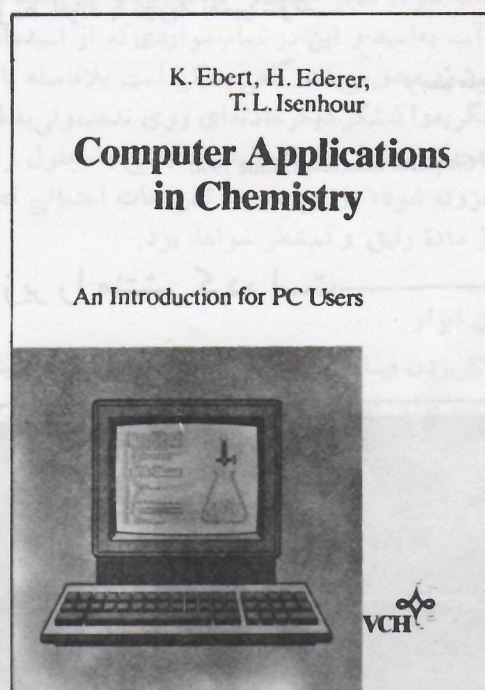


کاربردهای کامپیوتر در شیمی

بحث درباره طراحی نرم افزارهای جدید، پیگیری برنامه‌های پژوهشی و ارائه روشهای ساده تدریس خواهد بود. برای شیمیدان ابزار و وسایلی معرفی می شود که علاوه بر صرفه جویی در وقت و هزینه، کیفیت و دقت غیر قابل تصویری را ممکن می سازد و وی را در تحلیل نتایج، دقت در محاسبات، تنظیم جدولها و نمایش داده ها یاری می کند. آنچه تا کنون در لابلاي معادلات و فرمولهای خشك و بی روح درك می کرد به كمك كامپیوتر می تواند به تصویر بکشد و مفروضات فرایندها و تصورات و نادیده ها را ملموس تر سازد. بالاخره او قادر است دنیای کوانتومی اتمها و مولکولها را روشنتر از گذشته با ارائه تصاویر سه بعدی نمایش دهد. بی شك كامپیوتر در شكل جدیدش (PC) در تمامی ابعاد زندگی رسوخ کرده است و برای همگام بودن با انسانها در كشف رازها آنها در چنین گستره عظیم باید دانش به کارگیری آن را از هر جهت فرا گیریم.

کتاب کاربردهای کامپیوتر در شیمی یکی از اولین مجموعه کتابهای درسی است که برای تأمین اهداف فوق و افزایش تواناییهای علمی شیمیدانها در به کارگیری این وسیله سحرآمیز یعنی کامپیوتر نگاشته شده است. کامپیوتر به کلکسیونی از ابزارها تعلق دارد که امروزه شیمیدانها برای انجام امور خود در صنعت و پژوهش بدان نیازمند هستند. از انواع کامپیوترهای در دسترس، بدون تردید PC (کامپیوتر شخصی) جامعترین وسیله چند کاره ای است که نیاز شیمیدانها را به خوبی برآورده می سازد. مهمترین مشخصه کامپیوترهای PC این واقعیت است که می توانند رهیافت ساده تری، در مقایسه با سایر اعضای خانواده کامپیوتر، برای مسائل و کارهای متفاوت پیدا کنند. هر شیمیدان مایل است طرز استفاده از کامپیوتر را فرا گیرد و مسائل و مشکلات خود را با بهره گیری از کوتاهترین و مستقیمترین رهیافت حل کند. از این نظر، کامپیوتر PC با وسایل شیشه ای آزمایشگاهی که برای سنتز مواد جدید از آنها استفاده می شود یا با دستگاههای لازم برای اندازه گیری خواص ویژه مواد شیمیایی قابل مقایسه است.

در این کتاب که در حال حاضر به زبانهای آلمانی و روسی نیز ترجمه شده



K. Ebert, H. Ederer, T.L. Isenhour. Computer Application in Chemistry, An Introduction for PC Users, VCH, 1989.

امروزه کیفیت و کمیت در زندگی بیش از گذشته مطرح است. هر گام در جهت تأمین و پاسخگویی به نیازهای بشر باید با معیارهای دقیق علمی توأم باشد. این کیفیتها و کمیتها با استانداردهای بالا و معیارهای علمی دقیقتر جزء جداناپذیر زندگی انسان دوران اخیر شده است. نیازهای روزافزون برای نیل به قلمرو این استانداردها به کارگیری بیش از پیش کامپیوتر را در تمام شئون زندگی اجتناب ناپذیر ساخته است. آنجا که سخن از شیمی است

است سعی شده است تا متخصص شیمی را در به کارگیری کامل PC برای رفع نیازهایش یاری دهد. مؤلفان آن تلاش کرده اند تا کتاب به يك کتاب دستور کار سنتز مواد جدید که معمولاً شیمیدانها از آن استفاده می کنند شبیه باشد و او را فراتر از صرف به کارگیری يك نرم افزار و برنامه آماده برای حل مسائل خاص خود با یادگیری برنامه نویسی یاری دهد.

کتاب کاربردهای کامپیوتر در شیمی را می توان به منظوره های مختلف مورد استفاده قرارداد. از جهتی يك کتاب درسی با مباحث گوناگون و متنوع است و در تنظیم و تدوین فصول آن ترتیب منطقی رعایت شده است. در عین حال تلاش شده است يك کتاب راهنمای عملی نیز محسوب شود، زیرا در آن تعداد قابل ملاحظه ای مسائل شیمیایی و فیزیکی باره حل های ریاضی و برنامه های نمونه مناسب گنجانده شده است. از جهت دیگر، این کتاب در واقع کتاب مرجعی است که برنامه هایی را برای طرح مسائل خاص در شیمی و موضوعات مربوط تدارك دیده است. در نهایت امر حداقل می توان از آن به عنوان يك راهنمای مطالعه استفاده کرد و با بهره گیری از آن به اطلاعاتی دست یافت که برای پیرایش برنامه های کامپیوتری یا توسعه برنامه های جدید نیاز است.

بحث درباره مناسبترین زبان کامپیوتر تقریباً به اندازه خود دانش کامپیوتر قدمت دارد. Basic زبان کامپیوتر است، مشروط بر اینکه به عنوان مترجم یا مفسر از آن استفاده شود. در این زبان کمترین اطلاعات ممکن درباره کار سیستم و سخت افزار کامپیوتر گنجانده شده و بنابراین می تواند به خوبی مورد استفاده شیمیدانها، از جمله شیمیدانهای که اطلاعات اندکی از کامپیوتر دارند، قرار گیرد. کتاب حاضر زبان Basic را که در IBM آن را Basica می نامند و توسط تمام کامپیوترهای PC سازگار با IBM قابل فهم است استفاده کرده است. این نکته پذیرفته شده است که Basic برای افراد خبره چندان تخصصی نیست یا دستکم می توان گفت با استفاده از این زبان مشکل می توان برای داده های پیچیده برنامه های با ساختار خوب نوشت. در مسیر دستیابی به تخصص در کامپیوتر، با استفاده از زبان Fortran یا Assembler، احتمالاً در سطح Pascal توقفی ایجاد خواهد شد و این توقف چند امتیاز مهم در بر دارد. علاوه بر این، محتمل است که در آینده ای نه چندان دور Pascal به عنوان زبان مورد استفاده مبتدیان، زبان Basic را کنار بزنند. بنابراین تمامی برنامه های این کتاب به زبان Turbo-Pascal برگردانده شده و این شکل از برنامه ها در انتهای کتاب فهرست شده است.

نرم افزارها دیگر با تایپ کردن انتقال نمی یابند. انتقال دهنده الکترونیکی وسیله ای جدید برای برقراری ارتباط است. بنابراین در این کتاب تمامی برنامه ها به صورت فایل های ASCII در دو دیسک نرم ضبط و ضمیمه کتاب شده است. دیسک I شامل برنامه هایی با نرم افزار «GW Basic» (در IBM Basica) و دیسک II حاوی مجموعه داده های برگردانده شده به Turbo-Pascal است. به خوانندگان توصیه شده است اگر تازه کارند مستقیماً با Pascal کار نکنند، ولی در عین حال یادآوری شده است پس از کسب مهارت های لازم از زبان Pascal برای پردازش سریعتر استفاده نمایند.

کتاب کاربردهای کامپیوتر در شیمی ظاهری ریاضی دارد ولی به طور حتم يك کتاب ریاضی یا آنالیز عددی نیست. از این رو در این کتاب روابط ریاضی و معادلات دیفرانسیل بدون استدلال ارائه شده است. بدیهی است اگر خواننده علاقه مند است باید آنها را در کتابهای درسی مناسب و در مباحث ریاضیات عددی جستجو کند.

کتاب حاضر از پانزده فصل تشکیل شده است. در فصل اول مقدمه ای درباره مناسبترین زبان کامپیوتر آمده است و در فصل دوم درباره نحوه تصحیح برنامه ها بحث و ارائه طریق شده است. در این فصل همچنین چگونگی برنامه نویسی برای موضوعات شیمی فیزیکی نظیر پویش آزاد متوسط، قانون توزیع ماکسول، قانون پلانک با استفاده از تابش جسم سیاه، تبدیل درجه سلسیوس به درجه فارنهایت، محاسبه پتانسیل نفوذ محلول های الکترولیت مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل سوم برنامه هایی در مورد سریها شامل سریهای هندسی، سریهای فوریه، انتقال گرما، توابع تقسیم آمده است. در فصول دیگر کتاب برنامه هایی در مورد نحوه محاسبه انحراف استاندارد و میانگینها، فرمول مولکولی يك ترکیب شیمیایی با استفاده از تجزیه عنصری و فرمول مولکولی با استفاده از طیف نورسنج جرمی با تفکیک بالا، شبیه سازی مراحل تشکیل يك همبسط، محاسبه زاویه پراکندگی براگ با استفاده از نتایج پراش پرتو ایکس، شبیه سازی ستون کروماتوگرافی گازی، محاسبه تعداد ایزومرها، حل معادلات دیفرانسیل برای نوسان کننده های هارمونیک ارائه شده است. یکی از جالبترین برنامه هایی که برای شیمیدانها از اهمیت ویژه ای برخوردار است شاید نمایش سه بعدی نگاره ها و همچنین مولکولها باشد. برنامه های مربوط به نگاره های کامپیوتری و نگاره های سه بعدی در فصل ۱۳ ارائه شده است. استفاده از نگاره ها کار برنامه سازی را خوش آیندتر و ارائه نتایج مسائل حل شده را مطلوبتر می سازد. بنابراین، بهتر است در همان مراحل اولیه فراگیری کامپیوتر و همچنین در هر فرصت ممکن از این نگاره ها بهره گیری شود. ارزشمندی این نگاره ها به زودی نمایان می شود. کارایی و سودمندی کامپیوترهای PC در مطالعات مدل سازی و شبیه سازی که در نظامهای تجربی به گونه فزاینده ای اهمیت پیدا می کنند به اثبات رسیده است. به عنوان مقدمه ای بر این زمینه ها، برخی روشهای عددی ارائه شده است که می تواند به حل برخی مسائل عمومی کمک کند. سایر زمینه های کاربردی کامپیوتر در علوم تجربی، اقتصادی کردن فرایندها و داده پردازی است. در این کتاب برخی از کاربردهای ساده در این زمینه ها ارائه شده که ممکن است به انتخاب بهترین راههای استفاده از کامپیوترهای PC در این نوع کارها کمک کند. پتانسیل کامپیوترهای جدید PC تقریباً گسترده است، ولی اتخاذ تصمیم در این مورد که چگونه و در کجا از آنها استفاده کنیم در اختیار ماست. همان طور که مؤلفان نیز یادآور شده اند برخی از برنامه های ارائه شده شاید به هنگام پردازش با اشتباهاتی توأم باشد، ولی تردید نیست خواننده با کسب دانش و مهارت لازم و فراگیری اصول قادر به تصحیح و رفع آنها خواهد بود.

شورای عالی برنامه ریزی وزارت فرهنگ و آموزش عالی از مدتها پیش در صدد بود در قالب يك درس تحت عنوان کاربردهای کامپیوتر در شیمی در مقطع کارشناسی یا کارشناسی ارشد مهارت دانشجویان شیمی را در به کارگیری این وسیله مهم که امروزه با زندگی معمولی و علمی ما آمیخته شده است افزایش دهد، ولی متأسفانه يك کتاب درسی سازمان یافته که بتواند این هدف را برآورد سازد در دسترس نبود. از این رو کتاب حاضر که در نوع خود اگر نگوییم بهترین ولی حداقل تازه ترین است می تواند در تأمین این هدف کارساز باشد. ناگفته نماند مرکز نشر دانشگاهی در نظر دارد به زودی نسبت به ترجمه و انتشار آن اقدام نماید.

داور بقاعی، محمد باقر پورسید