

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به:

برادرم وحید

به امید نوید روزهای خوب

تقدیر و تشکر از:

اساتید عزیزم

به ویژه جناب آقای دکتر نادر زبردبیه پاس زحمات بی دریغش

بسمه تعالی

در تاریخ: ۱۳۹۰/۴/۲۹

دانشجوی کارشناسی ارشد آقای/خانم الهام عبداللهی پور از پایان نامه خود دفاع نموده وبا
نمره: ۲۰ بحروف: بیست وبا درجه: عالی
مورد تصویب قرار گرفت.

امضاء استاد راهنما

دانشکده : علوم پایه

نام واحد دانشگاهی : تهران مرکزی کد واحد ۱۰۱	کد شناسایی رساله: ۱۰۱۳۰۳۰۸۸۹۱۰۰۶
نام و نام خانوادگی دانشجو: الهام عبداللهی پور شماره دانشجویی: ۸۷۰۸۵۱۳۳۷۰۰	سال و نیمسال اخذ رساله: ۹۰ - ۸۹ رشته ی تحصیلی: شیمی آلی
عنوان رساله: تأثیر هترواتم بر روی عملکرد برگشت پذیر چندماشین مولکولی بر اساس محاسبات کوانتومی Ab inito	
نام و نام خانوادگی استاد راهنما: دکتر مرجانه صمدی زاده نام و نام خانوادگی استاد مشاور: دکتر شیوا مسعودی	
تعداد واحد رساله : ۸	نمره رساله دانشجو :
تاریخ تصویب پروپوزال : ۸۹/۸/۱	به عدد :
تاریخ صدور کد شناسایی: ۸۹/۹/۱۶	به حروف :
تاریخ دفاع از رساله : ۹۰/۴/۲۹	
چکیده پایان نامه(شامل خلاصه ،اهداف ، روش های اجرا و نتایج به دست آمده):	
<p>شیمی محاسباتی با به کار بردن نرم افزارهای کامپیوتری، ابزاری قدرتمند در طراحی ماشین های مولکولی است. شیمی محاسباتی، عبارتی عمومی و کلی است که گستره ی وسیعی از روش ها و تقریب ها را در بر می گیرد و با استفاده از قوانین ریاضی و تئوری، به حل مسائل شیمی می پردازد.</p> <p>امروزه روش های محاسبات مکانیک کوانتومی به عنوان ابزاری مهم در پژوهش های مربوط به علم شیمی به شمار می آیند زیرا توانایی محاسبه و پیش بینی ساختار انرژی و سایر ویژگی های موجود در مولکول ها را دارا هستند.</p> <p>این محاسبات کمک می کنند تا دریابیم چه گونه هایی برای بررسی آزمایشگاهی مناسب اند یا چه گونه هایی پایداری لازم را برای تبدیل شدن به یک ماده ی کاربردی دارند. در سایه ی این محاسبات، حتی در مواردی به مطالعات تأیید کننده ی آزمایشگاهی نیاز نداریم. در واقع شیمی محاسباتی، شاخه ای از علم در ارتباط با تحلیل و اندازه گیری خواصی از مواد می باشد که به طور مستقیم قابل اندازه گیری نیستند و از علمی نظیر ریاضی و آمار سود می برند در حالی که نتایج به دست آمده، کامل کننده ی اطلاعات به دست آمده از آزمایش های شیمیایی هستند.</p> <p>از جمله نرم افزارهایی که در این تحقیق از آن ها استفاده شده است، گوسین 98 , Chem Office , Gauss View می باشد. توسط این نرم افزارها، طراحی چند ماشین مولکولی انجام شد و مقادیر انرژی تشکیل، HF و نیز میزان اختلاف انرژی بین ایزومرها، ΔE، محاسبه گردید. همچنین ساختارهای بهینه ی هر یک به تصویر کشیده شد. در هر دسته از ماشین ها، هترواتم های مختلف جایگزین شدند تا پایدار ترین وضعیت، برای ماشین و در مسیر بهبود عملکرد آن معین گردید. در نهایت با مقایسه ی مقادیر ذکر شده و در نظر گرفتن ساختار های نهایی مولکول ها، در مورد پایداری آن ها و دلایل این پایداری، بحث و نتیجه گیری شده است.</p>	

امضاء استاد راهنما :

امضاء مدیر گروه :

امضاء ریاست دانشکده :

تاریخ :

تاریخ :

تاریخ :

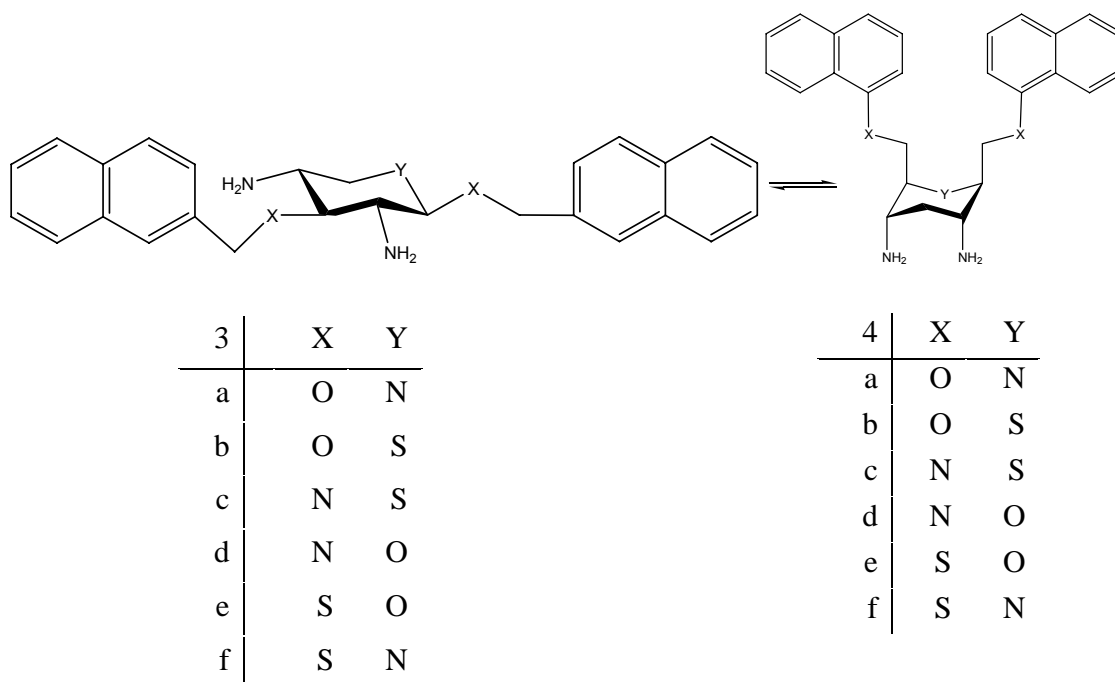
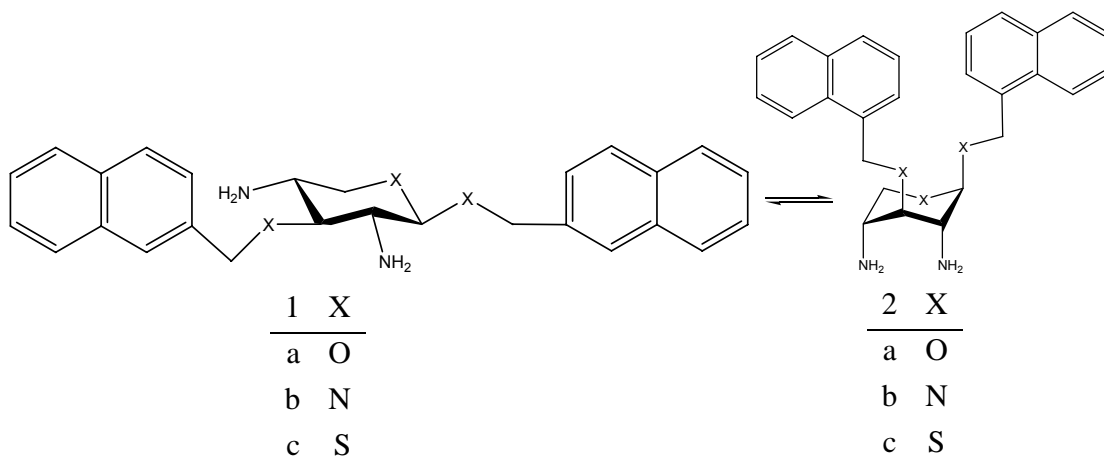
چکیده:

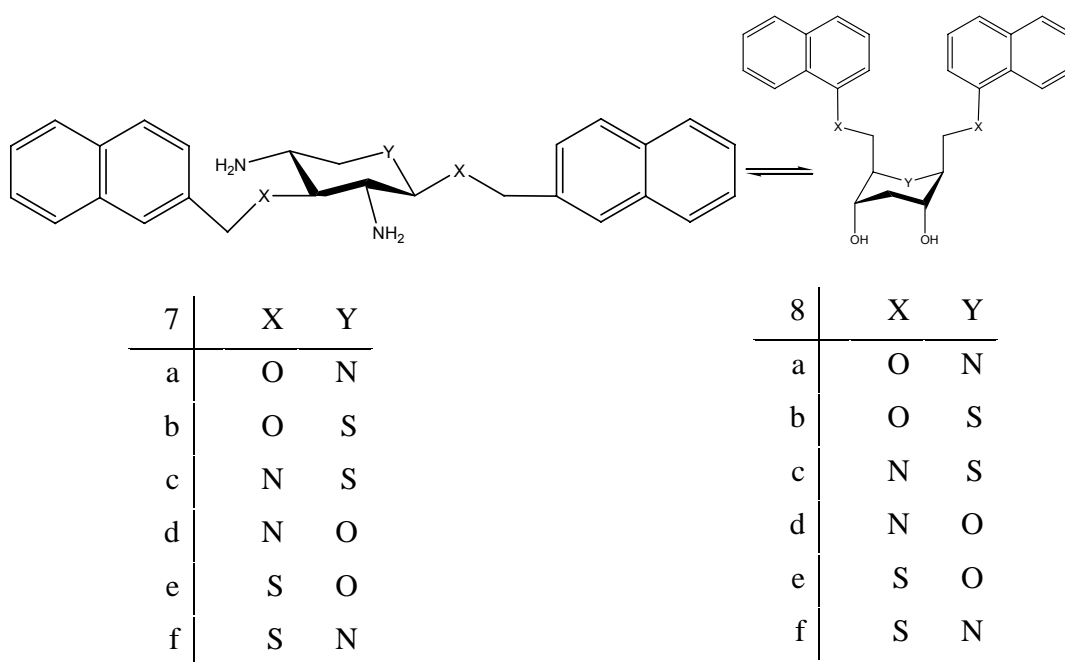
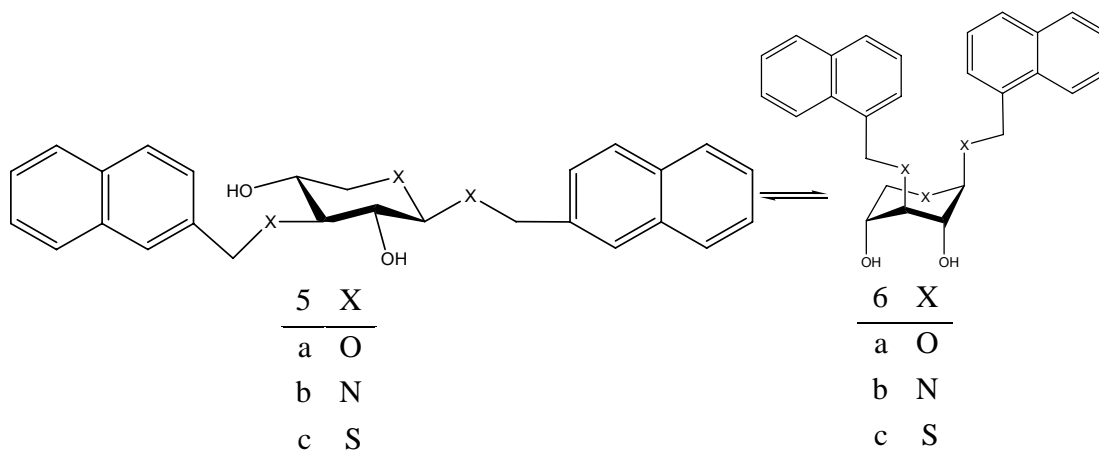
شیمی محاسباتی با به کار بردن نرم افزارهای کامپیوتری، ابزاری قدرتمند در طراحی ماشین های مولکولی است. شیمی محاسباتی، عبارتی عمومی و کلی است که گستره ی وسیعی از روش ها و تقریب ها را در بر می گیرد و با استفاده از قوانین ریاضی و تئوری، به حل مسائل شیمی می پردازد.

امروزه روش های محاسبات مکانیک کوانتومی به عنوان ابزاری مهم در پژوهش های مربوط به علم شیمی به شمار می آیند زیرا توانایی محاسبه و پیش بینی ساختار انرژی و سایر ویژگی های موجود در مولکول ها را دارا هستند.

این محاسبات کمک می کنند تا دریابیم چه گونه هایی برای بررسی آزمایشگاهی مناسب اند یا چه گونه هایی پایداری لازم را برای تبدیل شدن به یک ماده ی کاربردی دارند. در سایه ی این محاسبات، حتی در مواردی به مطالعات تأیید کننده ی آزمایشگاهی نیاز نداریم. در واقع شیمی محاسباتی، شاخه ای از علم در ارتباط با تحلیل و اندازه گیری خواصی از مواد می باشد که به طور مستقیم قابل اندازه گیری نیستند و از علومی نظیر ریاضی و آمار سود می برند در حالی که نتایج به دست آمده، کامل کننده ی اطلاعات به دست آمده از آزمایش های شیمیایی هستند.

از جمله نرم افزارها و برنامه هایی که در این تحقیق از آن ها استفاده شده است؛ گوسین ۹۸، Chem Office, Gauss View می باشد. به وسیله ی این نرم افزارها، طراحی چند ماشین مولکولی انجام شد و مقادیر انرژی تشکیل، HF، و نیز میزان اختلاف انرژی بین ایزومرها، ΔE ، محاسبه گردید. همچنین ساختارهای بهینه ی هر یک به تصویر کشیده شد. در هر دسته از ماشین ها، هترواتم های مختلف جایگزین شدند تا پایدارترین وضعیت، برای ماشین و در مسیر بهبود عملکرد آن معین گردد. در نهایت با مقایسه ی مقادیر ذکر شده و در نظر گرفتن ساختارهای نهایی مولکول ها، در مورد پایداری آن ها و دلایل این پایداری، بحث و نتیجه گیری شده است. در ادامه، ساختارهای طراحی شده در این تحقیق، که شامل ایزومرهای زایلوپیرانوزید هستند، آورده شده اند:





فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: مبانی شیمی محاسباتی

۱	۱-۱- مقدمه	
۳	۲-۱- تئوری مکانیکی مولکولی (MM)	
۴	۱-۲-۱- انواع روش های مکانیک مولکولی	
۵	۳-۱- تئوری ساختار الکترونی	
۶	۱-۳-۱- روش های نیمه تجربی	
۷	۱-۱-۳-۱- روش بسط یافته ی هوکل	
۷	۲-۱-۳-۱- روش های NDO	
۹	۳-۱-۳-۱- روش های براساس صرف نظرکردن از همپوشانی تفاضلی دو اتمی (NDDO)	
۱۰	۲-۳-۱- روش های از اساس یا آغازین	
۱۱	۱-۲-۳-۱- فرضیه های مورد استفاده در روش از اساس	
۱۱	۲-۲-۳-۱- مراحل اجرای روش از اساس	
۱۲	۳-۲-۳-۱- منابع خطا در محاسبات روش از اساس	
۱۳	۳-۳-۱- مقایسه ی روش های از اساس (آغازین) با روش های نیمه تجربی	
۱۴	۴-۱- روش های کوانتومی Ab Initio	
۱۴	۱-۴-۱- تئوری اوربیتال مولکولی Ab Initio	
۱۶	۱-۱-۴-۱- روش برهم کنش پیکربندی (CI)	
۱۷	۲-۱-۴-۱- روش های بر اساس تقریب خوشه ای جفت شده (CCA)	
۱۷	۳-۱-۴-۱- MCSCF	
۱۸	۴-۱-۴-۱- خصوصیات تئوری مولکولی از اساس	
۲۰	۵-۱- روش میدان خود سازگار هارتری - فاک (روش HF)	
۲۰	۱-۵-۱- معادلات هارتری - فاک	
۲۱	۲-۵-۱- تقریب هارتری - فاک	

۲۲ تقریب هارتری ۳-۵-۱
۲۲ محاسبات هارتری- فاک محدود و نا محدود شده ۴-۵-۱
۲۳ روش هارتری- فاک مولکول ها ۵-۵-۱
۲۴ تقریب بورن- اینهایمر ۶-۵-۱
۲۶ نظریه ی کوهن- هوهنبرگ ۷-۵-۱
۲۸ روش کوهن- شام ۸-۵-۱
۲۹ نظریه ی اغتشاش مولر- پلاست ۶-۱
۳۰ روش های MP_n ۱-۶-۱
۳۱ روش های بالاتر ۲-۶-۱
۳۱ معادلات روتان - هال ۷-۱

فصل دوّم: تئوری محاسبات

۳۴ معرفی ۱-۲
۳۴ عملکرد کامپیوتر ۲-۲
۳۵ مزایای کامپیوتر ۳-۲
۳۵ محاسبات Ab Initio ۴-۲
۳۵ برنامه های کاربردی Ab Initio ۱-۴-۲
۳۶ مثال هایی از کاربرد Ab Initio ۲-۴-۲
۴۰ معرفی نرم افزار گوسین ۹۸ ۵-۲
۴۱ فعالیت های تکنیکی گوسین ۱-۵-۲
۴۳ مجموعه های پایه ی (Basis Sets) ۲-۵-۲
۴۴ انواع مجموعه های پایه ۱-۲-۵-۲
۴۴ مجموعه پایه ی حداقل ۲-۲-۵-۲
۴۴ مجموعه پایه ی زتای دوگانه ۳-۲-۵-۲
۴۵ مجموعه پایه ی زتای سه گانه ۴-۲-۵-۲

- ۴۵-۲-۵-۲-۵- مجموعه پایه ی ظرفیتی شکافته
- ۴۶-۲-۵-۲-۶- مجموعه پایه ی پلاریزه
- ۴۶-۲-۵-۲-۷- مجموعه پایه ی نفوذی
- ۴۷-۲-۵-۳- واژه های کلیدی رایج در گوسین ۹۸
- ۵۰-۲-۵-۴- مروری بر مشخصات مولکول در گوسین
- ۵۱-۲-۵-۵- مشخص کردن فایل حافظه ی مجازی و کار با آن
- ۵۲-۲-۵-۶- محاسبات انجام پذیر در گوسین
- ۵۳-۲-۵-۷- ترموشیمی در گوسین ۹۸
- ۵۴-۲-۵-۸- منحنی انرژی پتانسیل (PES) و تعیین ساختارهای با انرژی مینیمم
- ۵۶-۲-۵-۹- تعیین ساختارهای حالت گذار و مسیر واکنش ها
- ۵۷-۲-۵-۱۰- انتخاب روش
- ۵۸-۲-۵-۱۱- بررسی کاربردهای گوسین و اطلاعات ترمودینامیکی (آنالیز کنفورماسیونی)
- ۵۸-۲-۵-۱۱-۱- روش به کار رفته در آنالیز کنفورماسیونی
- ۶۰-۲-۶-۶- معرفی نرم افزار کم آفیس
- ۶۰-۲-۶-۱- کاربردهای کم آفیس
- ۶۱-۲-۷-۲- نرم افزار Gauss View

فصل سوم: ماشین های مولکولی

- ۶۳-۳-۱- مقدمه:
- ۶۴-۳-۲- ویژگی ماشین در سطح مولکولی
- ۶۵-۳-۳- تاریخچه ی ساخت ماشین های مولکولی
- ۶۶-۳-۴- طراحی ماشین های مولکولی
- ۶۷-۳-۵- برنامه های تحقیقاتی موثر در زمینه ی طراحی و ساخت ماشین های مولکولی
- ۶۷-۳-۶- نحوه ی عملکرد ماشین های مولکولی
- ۶۹-۳-۷- ماشین های مولکولی و شیمی مافوق ذره
- ۷۱-۳-۸- ویژگی های موتورهای مولکولی

- ۷۱ ۹-۳- منبع انرژی ماشین های مولکولی
- ۷۲ ۱۰-۳- انواع ماشین های مولکولی
- ۷۲ ۱-۱۰-۳- ماشین های مولکولی طبیعی و انواع آن ها
- ۷۴ ۲-۱۰-۳- ماشین های مولکولی مصنوعی
- ۷۴ ۱-۲-۱۰-۳- روتاکسان ها و کاتنان ها
- ۷۸ ۲-۲-۱۰-۳- فیچی های مولکولی
- ۸۰ ۳-۲-۱۰-۳- حسگرهای مولکولی
- ۸۱ ۴-۲-۱۰-۳- سوئیچ های مولکولی
- ۸۲ ۵-۲-۱۰-۳- قطارهای مولکولی
- ۸۳ ۶-۲-۱۰-۳- چرخنده های مولکولی

فصل چهارم: روش های محاسبه

- ۸۷ ۱-۴- مقدمه:
- ۸۸ ۲-۴- روش کار
- ۸۸ ۳-۴- سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۸۸ ۱-۳-۴- دسته ی اول
- ۸۹ ۲-۳-۴- دسته ی دوّم
- ۸۹ ۳-۳-۴- دسته ی سوّم
- ۹۴ ۴-۳-۴- مقایسه ی مقادیر انرژی (نتیجه گیری)
- ۹۴ ۴-۴- سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۹۴ ۱-۴-۴- دسته ی اول
- ۹۵ ۲-۴-۴- دسته ی دوّم
- ۹۵ ۳-۴-۴- دسته ی سوّم

- ۹۵ ۴-۴-۴ دسته ی چهارم
- ۹۶ ۵-۴-۴ دسته ی پنجم
- ۹۶ ۶-۴-۴ دسته ی ششم
- ۱۰۵ ۷-۴-۴ مقایسه ی مقادیر انرژی (بحث و نتیجه گیری)
- ۱۰۵ ۵-۴-۴ سری سوّم ایزومرهای زایلویپیرانوزید
- ۱۰۵ ۱-۵-۴ دسته ی اوّل
- ۱۰۶ ۲-۵-۴ دسته ی دوّم
- ۱۰۶ ۳-۵-۴ دسته ی سوّم
- ۱۱۱ ۴-۵-۴ دسته ی چهارم
- ۱۱۱ ۵-۵-۴ دسته ی پنجم
- ۱۱۱ ۶-۵-۴ دسته ششم
- ۱۱۲ ۷-۵-۴ دسته ی هفتم
- ۱۱۲ ۸-۵-۴ دسته ی هشتم
- ۱۱۳ ۹-۵-۴ دسته ی نهم
- ۱۲۲ ۱۰-۵-۴ مقایسه ی مقادیر انرژی (بحث و نتیجه گیری)

فهرست شکل ها

عنوان	صفحه
شکل (۱-۲): ساختارهایی برای رادیکال سیکلواکتاترانیل	۴۰
شکل (۲-۲): منحنی انرژی پتانسیل	۵۵
شکل (۳-۲): روش قطعه قطعه کردن	۶۰
شکل (۱-۳): نمایی از ماشین مولکولی تولید کننده ی ATP	۷۳
شکل (۲-۳): نمایی از ساختار یک روتاکسان	۷۵
شکل (۳-۳): ساختار شماتیکی حرکت قطاری درون مولکولی روتاکسان	۷۵
شکل (۴-۳): ساختار شماتیکی حرکت چرخشی حلقه در روتاکسان	۷۶
شکل (۵-۳): ساختار شماتیکی عملکرد یک روتاکسان	۷۶
شکل (۶-۳): ساختار کلی یک کاتنان	۷۷
شکل (۷-۳): ساختار یک قیچی مولکولی	۷۹
شکل (۸-۳): شماتیک نحوه ی عمل یک قیچی مولکولی	۸۰
شکل (۹-۳): ساختار زایلوپیرانوزید به عنوان یک حسگر فلورسانسی	۸۰
شکل (۱۰-۳): نمایی از یک سوئیچ مولکولی فوتوکرومیک	۸۲
شکل (۱۱-۳): مکانیسم حرکت یک قطار مولکولی	۸۲
شکل (۱۲-۳): نمایی از ساختار یک قطار مولکولی	۸۳
شکل (۱۳-۳): ساختار یک چرخنده ، هدایت شده به وسیله ی نور	۸۴
شکل (۱-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی اول)	۸۸
شکل (۲-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی دوم)	۸۹

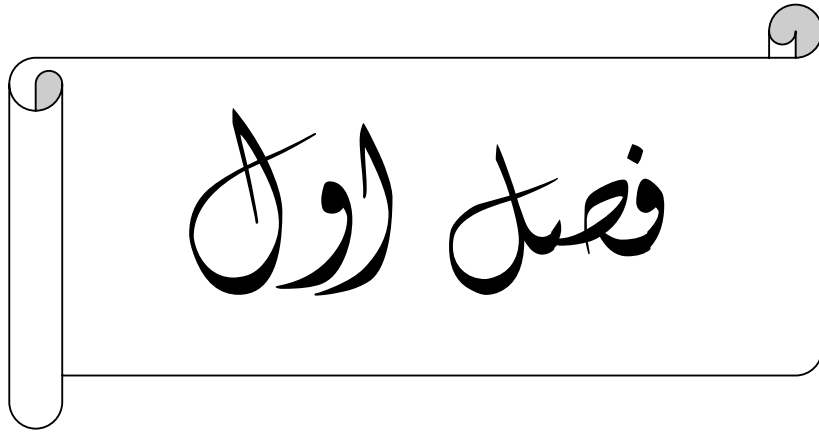
- شکل (۳-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی سوّم) ۸۹
- شکل (۴-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (اولین دسته از سری دوّم) ۹۴
- شکل (۵-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دوّمین دسته از سری دوّم) ۹۵
- شکل (۶-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (سوّمین دسته از سری دوّم) ۹۵
- شکل (۷-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (چهارمین دسته از سری دوّم) ۹۶
- شکل (۸-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (پنجمین دسته از سری دوّم) ۹۶
- شکل (۹-۴): ساختار ایزومرهای زایلوپیرانوزید (ششمین دسته از سری دوّم) ۹۶
- شکل (۱۰-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی اوّل از سری سوّم) ۱۰۵
- شکل (۱۱-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی دوّم از سری سوّم) ۱۰۶
- شکل (۱۲-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی سوّم از سری سوّم) ۱۰۶
- شکل (۱۳-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی چهارم از سری سوّم) ۱۱۱
- شکل (۱۴-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی پنجم از سری سوّم) ۱۱۱
- شکل (۱۵-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی ششم از سری سوّم) ۱۱۲
- شکل (۱۶-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی هفتم از سری سوّم) ۱۱۲
- شکل (۱۷-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی هشتم از سری سوّم) ۱۱۳
- شکل (۱۸-۴): ساختار های ایزومرهای زایلوپیرانوزید (دسته ی نهم از سری سوّم) ۱۱۳

فهرست جدول ها

صفحه	عنوان
۴۹	جدول (۱-۲) - پیش بینی خواص مولکولی با کمک گوسین
	جدول (۱-۴) - انرژی های تشکیل، HF، اولین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۰	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
	جدول (۲-۴) - انرژی های تشکیل، HF، دومین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۰	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
	جدول (۳-۴) - انرژی های تشکیل، HF، سومین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۰	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
۹۱	جدول (۴-۴) - ساختارهای بهینه ی اولین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۲	جدول (۵-۴) - ساختارهای بهینه ی دومین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۳	جدول (۶-۴) - ساختارهای بهینه ی سومین دسته از سری اول ایزومرهای زایلوپیرانوزید
	جدول (۷-۴) - انرژی های تشکیل، HF، اولین دسته از سری دوم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۷	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
	جدول (۸-۴) - انرژی های تشکیل، HF، دومین دسته از سری دوم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۷	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
	جدول (۹-۴) - انرژی های تشکیل، HF، سومین دسته از سری دوم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۷	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
	جدول (۱۰-۴) - انرژی های تشکیل، HF، چهارمین دسته از سری دوم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
۹۸	برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)

- جدول (۴-۱۱) - انرژی های تشکیل، HF، پنجمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
 برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol) ۹۸
- جدول (۴-۱۲) - انرژی های تشکیل، HF، ششمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
 برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol) ۹۸
- جدول (۴-۱۳) - ساختارهای بهینه ی اولین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۹۹
- جدول (۴-۱۴) - ساختارهای بهینه ی دوّمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۰
- جدول (۴-۱۵) - ساختارهای بهینه ی سوّمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۱
- جدول (۴-۱۶) - ساختارهای بهینه ی چهارمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۲
- جدول (۴-۱۷) - ساختارهای بهینه ی پنجمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۳
- جدول (۴-۱۸) - ساختارهای بهینه ی ششمین دسته از سری دوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۴
- جدول (۴-۱۹) - انرژی های تشکیل، HF، اولین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
 برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol) ۱۰۷
- جدول (۴-۲۰) - انرژی های تشکیل، HF، دوّمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
 برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol) ۱۰۷
- جدول (۴-۲۱) - انرژی های تشکیل، HF، سوّمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
 برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol) ۱۰۷
- جدول (۴-۲۲) - ساختارهای بهینه ی اولین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۸
- جدول (۴-۲۳) - ساختارهای بهینه ی دوّمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۰۹
- جدول (۴-۲۴) - ساختارهای بهینه ی سوّمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید ۱۱۰
- جدول (۴-۲۵) - انرژی های تشکیل، HF، چهارمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید

- ۱۱۴ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۲۶) - انرژی های تشکیل HF، پنجمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۴ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۲۷) - انرژی های تشکیل HF، ششمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۴ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۲۸) - انرژی های تشکیل HF، هفتمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۵ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۲۹) - انرژی های تشکیل HF، هشتمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۵ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۳۰) - انرژی های تشکیل HF، نهمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۵ برحسب Hartree و اختلاف انرژی آن ها برحسب (Kcal/mol)
 جدول (۴-۳۱) - ساختارهای بهینه ی چهارمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۶ جدول (۴-۳۲) - ساختارهای بهینه ی پنجمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۷ جدول (۴-۳۳) - ساختارهای بهینه ی ششمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۸ جدول (۴-۳۴) - ساختارهای بهینه ی هفتمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۱۹ جدول (۴-۳۵) - ساختارهای بهینه ی هشتمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید
- ۱۲۰ جدول (۴-۳۶) - ساختارهای بهینه ی نهمین دسته از سری سوّم ایزومرهای زایلوپیرانوزید



مبانی نظری شیمی محاسباتی

۱-۱- مقدمه

شیمی محاسباتی شاخه‌ای از دانش شیمی است که سعی در حل مسائل شیمی با کمک رایانه‌ها دارد. در این رشته از رایانه‌ها برای پیش‌بینی ساختار مولکولی، خواص مولکولی و واکنش‌های شیمیایی استفاده می‌شود. و از نتایج شیمی محض که در قالب برنامه‌های مؤثر کامپیوتری درآمده‌اند برای محاسبه‌ی ساختار و خواص مولکولی و جامدات استفاده مؤثر می‌شود.

در واقع شیمی محاسباتی شاخه‌ای از علم در ارتباط با تحلیل و اندازه‌گیری خواصی از مواد می‌باشد که به‌طور مستقیم قابل اندازه‌گیری نیستند و از علومی نظیر ریاضی و آمار سود می‌برند در حالی که نتایج به دست آمده، کامل‌کننده‌ی اطلاعات به دست آمده از آزمایش‌های شیمیایی هستند اما در برخی موارد می‌تواند منجر به پیش‌بینی پدیده‌های مشاهده شده شیمیایی شود.

محاسبات کمک می‌کنند تا دریابیم چه گونه‌هایی برای بررسی آزمایشگاهی مناسب‌اند یا چه گونه‌هایی پایداری لازم را برای تبدیل شدن به یک ماده کاربردی دارند و در سایه‌ی این محاسبات حتی در مواردی نیاز به مطالعات تأییدکننده‌ی آزمایشگاهی نداریم.

شیمی محاسباتی در عین حال که علمی نو می‌باشد، علمی قدیمی نیز محسوب می‌شود. این علم قدیمی نامیده می‌شود چرا که در ابتدای قرن بیستم پایه‌ی آن بنا نهاده شد و علمی جدید است به دلیل این که با پدید آمدن کامپیوترهای پیشرفته در سال‌های اخیر، قادر به انجام محاسبات با بیشترین سرعت در کمترین زمان می‌باشد.

از دلایل مهمی که امروزه شیمیدانان به کارهای محاسباتی روی آورده‌اند می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: