

رسالة محمد



دانشگاه مراغه

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی اثرات هم‌افزایی در پیوندهای هالوژنی و لیتیومی

استاد راهنما:

دکتر مهدی اسرافیلی دیزجی

استاد مشاور:

دکتر کریم کاکایی

پژوهشگر:

پروین فاتحی قلعه

مهر ۱۳۹۳

تقدیم و اهداء

با تقدیم به پدر بزرگواری که با گرمای امیدبخش خود وجودم آرامش می‌گیرد و به پاس محبت‌های بی‌دریغ مادرم که هرگز فروکش نمی‌کند، برادر عزیزم که در تمام مراحل زندگی همراه همیشگی و پشتیبانم است و مهربانی‌های خواهر عزیزم.

با تقدیم به استاد بزرگواری جناب آقای دکتر مهدی اسرافیلی دیزجی که با تمام وجود و با صبر و شکیبایی‌هایش در پیمودن این مسیر راهنمای راهم بودند.

تقدیر و تشکر

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که هستی‌مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد. از تلاش‌های مداوم و کوشش‌های مستمر استاد راهنمای دلسوزم جناب آقای دکتر مهدی اسرافیلی دیزجی که در اشاعه تعلیم و تربیت و بسط و توسعه‌ی علم و دانش راه‌گشایم بودند نهایت سپاسگذاری را می‌نمایم. نهایت تشکر و قدردانی را از زحمات استاد مشاور گرامی خود جناب آقای دکتر کریم کاکایی دارم. از مدیر گروه محترم شیمی جناب آقای دکتر غلامرضا مهدوی نیا سپاسگزارم. از جناب آقای دکتر اسماعیل وصالی که زحمت داوری این پایان‌نامه را بر عهده داشتند کمال تشکر را دارم. از خانواده عزیزم بویژه پدر و مادر مهربانم که هستی‌بخش وجودم هستند بی نهایت سپاسگزارم. از تمام دوستان عزیزم و کلیه کسانی که به نحوی در تهیه و تنظیم این پایان‌نامه یاری رسانم بودند تشکر و قدردانی می‌نمایم. از گروه شیمی دانشگاه مراغه و که انجام تمام مراحل محاسباتی این پایان‌نامه در آزمایشگاه شیمی کوانتومی صورت گرفت نهایت تقدیر و تشکر را دارم.

نام خانوادگی فاتحی قلعه	نام: پروین
استاد راهنما: دکتر مهدی اسرافیلی دیزجی	استاد مشاور: دکتر کریم کاکایی
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
گرایش: فیزیک	تعداد صفحه: ۹۷
دانشگاه: مراغه	تاریخ دانش آموختگی: ۹۳/۷-۹۱/۷
<p>کلید واژه: کلمات کلیدی: اثرات هم افزایی، QTAIM، برهمکنش لیتیمی، برهمکنش هیدروژنی، برهمکنش هالوژنی، EDA.</p>	
<p>چکیده: در این پایان نامه، ساختار و انرژی‌های برهمکنش پیوندهای هیدروژنی و لیتیمی در کمپلکس‌های حلقوی $(\text{HCN})_{n=3-8}$ و $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ مقایسه می‌شوند. محاسبات شیمی کوانتومی این کمپلکس‌ها با دو روش محاسباتی MP2 و B3LYP با مجموعه پایه $6-311++G^{**}$ صورت می‌گیرد. اثرات هم‌افزایی در کمپلکس‌های $\text{NCLi-NCLi-C}_2\text{X}_2$ و $\text{CNLi-CNLi-C}_2\text{X}_2$ که $\text{X} = \text{H, F, Cl, Br, CH}_3, \text{OH, OCH}_3$ نیز بررسی می‌گردد. در این کمپلکس‌ها، طول‌های پیوندی، انرژی‌های پیوندی و آنالیز اتم‌ها در مولکول (AIM) و آنالیز تجزیه انرژی (EDA) مطالعه می‌شود. نتایج حاصل از محاسبات، نشان می‌دهد که اثرات هم‌افزایی قابل توجهی در این کمپلکس‌ها وجود دارد و با افزایش قدرت الکترون دهنده‌گی استخلاف X، این اثرات نیز مهم‌تر می‌شوند. پارامترهای ساختاری و انرژی برهمکنش‌های هیدروژنی، هالوژنی و لیتیمی در کمپلکس‌های خطی XCN-HCN-YCN که $\text{X} = \text{H, F, NC}$; $\text{Y} = \text{H, Li, F, Cl, Br, I}$ نیز مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج QTAIM و EDA می‌رساند که ماهیت این برهمکنش‌ها از نوع الکترواستاتیکی بوده و با افزایش عدد اتمی هالوژن، انرژی برهمکنش هالوژنی افزایش می‌یابد.</p>	

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

۱	فصل اول
۲	۱- فصل اول- مقدمه‌ای بر شیمی محاسباتی
۲	۱-۱- مقدمه
۲	۱-۲- شیمی کوانتومی
۳	۱-۳- معادله‌ی شرودینگر
۴	۱-۴- شیمی محاسباتی
۵	۱-۴-۱- انواع روش‌های محاسباتی
۵	۱-۴-۱-۱- مکانیک مولکولی
۵	۱-۴-۱-۲- مکانیک کوانتومی
۶	۱-۵- روش‌های نیمه تجربی
۶	۱-۵-۱- انواع روش‌های نیمه تجربی
۸	۱-۶- روش‌های Ab initio
۹	۱-۶-۱- روش‌های هارتری-فاک
۱۰	۱-۶-۱-۱- تقریب بورن-اوپنهایمر
۱۱	۱-۶-۲- روش‌های فرا هارتری-فاک
۱۲	۱-۶-۲-۱- نظریه‌ی اختلال MPn
۱۲	۱-۶-۴- روش‌های چند مرجعی
۱۳	۱-۷- روش‌های تابعیت چگالی DFT
۱۴	۱-۷-۱- قضیه‌ی کوهن - هوهنبرگ

- ۱۵..... ۱-۱-۷-۱- اثبات قضیه‌ی کوهن و هوهنبرگ
- ۱۵..... ۲-۷-۱- قضیه کوهن - شم KS
- ۱۶..... ۳-۷-۱- بررسی تقریب‌ها و تابعیت‌های مختلف در محاسبات DFT
- ۱۶..... ۱-۳-۷-۱- تقریب چگالی موضعی (LDA)
- ۱۷..... ۲-۳-۷-۱- تابعیت‌های گرادیان تصحیح شده (GGA)
- ۱۸..... ۳-۳-۷-۱- تابعیت‌های متا-GGA
- ۱۹..... ۴-۷-۱- تابعیت‌های هیبریدی
- ۲۰..... ۸-۱- مجموعه‌های پایه
- ۲۰..... ۱-۸-۱- توابع نفوذ
- ۲۰..... ۲-۸-۱- توابع پلاریزاسیون
- ۲۲..... ۳-۸-۱- مجموعه پایه‌های همبستگی-سازگار
- ۲۳..... فصل دوم
- ۲۴..... ۱-۲- مقدمه
- ۲۴..... ۲-۲- اهمیت برهمکنش‌های بین مولکولی در سیستم‌های زیستی DNA و پروتئین‌ها
- ۲۵..... ۳-۲- برهمکنش چیست؟
- ۲۵..... ۴-۲- انواع برهمکنش‌ها
- ۲۵..... ۱-۴-۲- برهمکنش‌های کووالانسی
- ۲۶..... ۲-۴-۲- برهمکنش‌های غیر کووالانسی
- ۲۶..... ۵-۲- انواع برهمکنش‌های غیر کووالانسی
- ۲۶..... ۱-۵-۲- برهمکنش هیدروژنی (HB)

- ۲۸.....(DHB)برهمکنش های دی هیدروژنی
- ۲۹.....(LB)برهمکنش های لیتیمی
- ۳۰.....انواع برهمکنش های لیتیمی ۱-۳-۵-۲
- ۳۱..... XB برهمکنش هالوژنی ۴-۵-۲
- ۳۳.....(PB)برهمکنش پینکوژن ۵-۵-۲
- ۳۵.....(CB)برهمکنش کالکوژنی ۶-۵-۲
- ۳۶.....(IB)برهمکنش یونی ۷-۵-۲
- ۳۷.....واندروالسی برهمکنش ۸-۵-۲
- ۳۸.....آبگریز برهمکنش های ۹-۵-۲
- ۳۹.....هم‌افزایی یا سینرژی ۶-۲
- ۴۱.....۱-۶-۲ اثرات آنتی هم‌افزایی
- ۴۱.....۲-۶-۲ محاسبه‌ی اثرات هم‌افزایی
- ۴۳.....فصل سوم
- ۴۴.....۱-۳- مقدمه
- ۴۴.....۲-۳- برنامه‌های کامپیوتری
- ۴۵.....۳-۳- خطای انطباق مجموعه پایه BSSE
- ۴۶.....۴-۳- آنالیز اتم‌ها در مولکول AIM
- ۴۷.....۵-۳- روش‌های محاسباتی بکار رفته
- ۴۸.....۶-۳- ساختارهای بهینه‌سازی شده‌ی کمپلکس‌ها
- ۵۲.....۷-۳- نتایج ساختاری مربوط به کمپلکس‌های بهینه‌سازی شده

فصل چهارم.....۶۶

۱-۴- نتایج حاصل از محاسبات برهمکنش

۶۷..... خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ ، $(\text{HCN})_{n=3-8}$

۶۷..... ۱-۱-۴ - مقایسه‌ی فاصله‌های برهمکنش

۶۸..... ۲-۱-۴ - انرژی برهمکنش خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ ، $(\text{HCN})_{n=3-8}$

۶۹..... ۳-۱-۴ - اثرات هم‌افزایی

۷۰..... ۴-۱-۴ - فرکانس‌های کششی زیر قرمز و شدت‌های ارتعاش

۷۲..... ۵-۱-۴ - آنالیز QTAIM

۷۳..... نتیجه‌گیری

۷۴..... ۱-۲-۴ - مقایسه‌ی فاصله‌های برهمکنش $\text{Li}\dots\pi$ و $\text{Li}\dots\text{C}$ و $\text{Li}\dots\text{N}$

۱-۱-۲-۴ - بررسی فاصله‌های برهمکنش

۷۵..... در کمپلکس $\text{CNLi}\dots\text{CNLi}\dots\text{XC}\equiv\text{CX}$

۲-۱-۲-۴ - بررسی فاصله‌های برهمکنش

۷۶..... در کمپلکس $\text{NCLi}\dots\text{NCLi}\dots\text{XC}\equiv\text{CX}$

۷۶..... ۲-۲-۴ - انرژی برهمکنش کمپلکس‌ها با روش محاسباتی MP2

۷۷..... ۳-۲-۴ - انرژی برهمکنش کمپلکس‌ها با روش CCSD(T)

۷۷..... ۴-۲-۴ - اثرات هم‌افزایی کمپلکس‌ها

۷۸..... ۵-۳-۴ - آنالیز تجزیه‌ای انرژی (EDA)

۸۰..... ۶-۳-۴ - آنالیز QTAIM

۸۱..... نتیجه‌گیری

۱-۴-۴ - مقایسه‌ی فاصله‌ی برهمکنش $\text{N}\dots\text{Y}$ و $\text{N}\dots\text{H}$

- در کمپلکس های HCN...HCN...YCN ۸۱
- ۲-۴-۴- مقایسه‌ی فاصله‌ی برهمکنش N...Y و N...H
- در کمپلکس های FCN...HCN...YCN ۸۲
- ۳-۴-۴- مقایسه‌ی فاصله‌ی برهمکنش N...Y و N...H
- در کمپلکس های NCCN...HCN...YCN ۸۳
- ۴-۴-۴- انرژی‌های برهمکنش چند ذره‌ای در
- برهمکنش‌های هیدروژنی و لیتیمی و هالوژنی ۸۳
- ۵-۴-۴- آنالیز QTAIM ۸۵
- ۶-۴-۴- آنالیز EDA ۸۸
- ۷-۳-۴- نتایج انرژی هم‌افزایی کمپلکس‌ها ۹۱
- نتیجه‌گیری ۹۲

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱. حرکت ذره‌ای و موجی الکترون ۳
- شکل ۱-۲. پیوند هیدروژنی معمول بین هیدروژن‌های مولکول‌های H₂O و NH₃ ۲۸
- شکل ۲-۲. برهمکنش بین دو اتم هیدروژن DHB ۲۹
- شکل ۳-۲. برهمکنش هیدرید لیتیم ۳۰
- شکل ۴-۲. برهمکنش لیتیم و اتم هالوژن فلوئور ۳۰
- شکل ۵-۲. ساختار تتراهدروالی متشکل از برهمکنش لیتیمی ۳۱
- شکل ۶-۲. شمایی از برهمکنش هالوژنی ۳۲
- شکل ۷-۲. نمونه‌ای از برهمکنش پینکوژنی ۳۴

- شکل ۲-۸. نمونه‌ای از برهمکنش کالکوژنی ۳۵
- شکل ۲-۹. برهمکنش یونی بین اتم‌های سدیم و کلر ۳۶
- شکل ۲-۱۰. برهمکنش واندروالس بین اتم‌های نافلز ۳۷
- شکل ۲-۱۱. میسل معکوس (a); میسل متعارف (b) ۳۹
- شکل ۲-۱۲. ساختار تریمر و دیمرهاى مربوطه جهت محاسبات اثرات هم‌افزایی ۴۲
- شکل ۳-۱. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی خوشه‌های حلقوی مولکول‌های $(\text{HCN})_{n=3-8}$ ۴۸
- شکل ۳-۲. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی خوشه‌های حلقوی مولکول‌های $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ ۴۹
- شکل ۳-۳. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی مدل‌های (T) شکل $\text{NCLi-NCLi-C}_2\text{X}_2$ ۴۹
- شکل ۳-۴. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی مدل‌های (T) شکل $\text{CNLi-CNLi-C}_2\text{X}_2$ ۵۰
- شکل ۳-۵. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی مدل‌های خطی (HCN-HCN-XCN) ۵۰
- شکل ۳-۶. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی مدل‌های خطی FCN-HCN-XCN ۵۱
- شکل ۳-۷. ساختار بهینه‌سازی شده‌ی مدل‌های خطی NCCN-HCN-XCN ۵۱
- شکل ۴-۴. نمایش فاصله‌های برهمکنش کمپلکس‌ها ۷۵

۵۲..... فهرست جدول‌ها

- جدول های ۱-۳. طول‌های پیوندی خوشه‌های حلقوی
- ۵۲..... مولکول‌های $(\text{HCN})_{n=3-8}$ و $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش B3LYP
- جدول های ۲-۳. طول‌های پیوندی خوشه‌های حلقوی
- ۵۲..... مولکول‌های $(\text{HCN})_{n=3-8}$ و $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش MP2
- جدول ۳-۳. انرژی‌های برهمکنش خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش B3LYP ۵۳
- جدول ۳-۴. انرژی‌های برهمکنش خوشه‌های حلقوی $(\text{HCN})_{n=3-8}$ با روش B3LYP ۵۳

- جدول ۳-۵. انرژی‌های برهمکنش خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش MP2 ۵۳
- جدول ۳-۶. انرژی‌های برهمکنش خوشه‌های حلقوی $(\text{HCN})_{n=3-8}$ با روش MP2 ۵۴
- جدول ۳-۷. فرکانس‌های کششی بر حسب و شدت متناظر
- آنها در خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش B3LYP ۵۴
- جدول ۳-۸. فرکانس‌های کششی و شدت متناظر
- آنها در خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ با روش MP2 ۵۴
- جدول ۳-۹. فرکانس‌های کششی بر حسب و شدت متناظر
- آنها در خوشه‌های حلقوی $(\text{HCN})_{n=3-8}$ با روش (B3LYP) ۵۵
- جدول ۳-۱۰. فرکانس‌های کششی و شدت متناظر
- آنها در خوشه‌های حلقوی $(\text{HCN})_{n=3-8}$ با روش MP2 ۵۵
- جدول ۳-۱۱. نتایج آنالیز AIM خوشه‌های حلقوی مولکول‌های $(\text{HCN})_{n=3-8}$ ۵۵
- جدول ۳-۱۲. نتایج آنالیز AIM خوشه‌های حلقوی مولکول‌های $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ ۵۶
- جدول ۳-۱۳. طول پیوندهای لیتیمی کمپلکس‌های دوتایی $\text{CNLi} \dots \text{XC} \equiv \text{CX}$ ۵۶
- جدول ۳-۱۴. طول پیوندهای لیتیمی کمپلکس‌های سه‌تایی
- $\text{CNLi} \dots \text{CNLi} \dots \text{XC} \equiv \text{CX}$ ۵۶
- جدول ۳-۱۵. طول پیوندهای لیتیمی کمپلکس‌های دوتایی $\text{NCLi} \dots \text{XC} \equiv \text{CX}$ ۵۷
- جدول ۳-۱۶. طول پیوندهای لیتیمی کمپلکس‌های سه‌تایی
- $\text{NCLi} \dots \text{NCLi} \dots \text{XC} \equiv \text{CX}$ ۵۷
- جدول ۳-۱۷. نتایج انرژی بر همکنش کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی
- $\text{CNLi} \dots \text{CNLi} \dots \text{XC} \equiv \text{CX}$ با روش MP2 ۵۷

جدول ۳-۱۸. انرژی‌های برهمکنش لیتیمی کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی

۵۸..... CCSD(T) روش با CNLi... CNLi...XC≡CX

جدول ۳-۱۹. انرژی‌های برهمکنش لیتیمی کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی

۵۸..... MP2 روش با NCLi... NCLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۰. انرژی‌های برهمکنش لیتیمی کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی

۵۸..... CCSD(T) روش با NCLi... NCLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۱. نتایج آنالیز EDA کمپلکس‌های سه‌تایی CNLi...CNLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۲. نتایج آنالیز EDA کمپلکس‌های سه‌تایی NCLi... NCLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۳. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی CNLi... CNLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۴. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی CNLi... CNLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۵. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی NCLi... NCLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۶. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی NCLi... NCLi...XC≡CX

جدول ۳-۲۷. طول پیوندهای بهینه‌سازی شده برای کمپلکس‌های

دوتایی و سه‌تایی HCN-HCN-XCN

جدول ۳-۲۸. انرژی‌های برهمکنش چند ذره‌ای کمپلکس‌های HCN-HCN-XCN

جدول ۳-۲۹. نتایج آنالیز EDA کمپلکس‌های HCN-HCN-XCN

جدول ۳-۳۰. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی HCN-HCN-XCN

جدول ۳-۳۱. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی HCN-HCN-XCN

جدول ۳-۳۲. نتایج طول‌های پیوندی کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی FCN-HCN-XCN

جدول ۳-۳۳. نتایج انرژی‌های برهمکنش چند ذره‌ای کمپلکس‌های FCN-HCN-XCN

جدول ۳-۳۴. نتایج آنالیز EDA کمپلکس‌های سه‌تایی FCN-HCN-XCN

- جدول ۳-۳۵. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی FCN-HCN-XCN ۶۳
- جدول ۳-۳۶. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی HCN-HCN-XCN ۶۴
- جدول ۳-۳۷. طول پیوندهای کمپلکس‌های دوتایی و سه‌تایی NCCN-HCN-XCN ۶۴
- جدول ۳-۳۸. انرژی بر همکنش چند ذره‌ای کمپلکس‌های NCCN-HCN-XCN ۶۴
- جدول ۳-۳۹. نتایج آنالیز EDA کمپلکس‌های سه‌تایی NCCN-HCN-XCN ۶۵
- جدول ۳-۴۰. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی NCCN-HCN-XCN ۶۵
- جدول ۳-۴۱. نتایج آنالیز AIM کمپلکس‌های سه‌تایی NCCN-HCN-XCN ۶۵

فهرست نمودارها

شکل ۴-۱. رابطه‌ی بین انرژی کلی و انرژی هم‌افزایی در خوشه‌های حلقوی $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ (a) و

۷۰ (b) $(\text{HCN})_{n=3-8}$

شکل ۴-۲. رابطه بین فرکانس کششی و در خوشه‌های حلقوی

۷۱ (a) $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ و (b) $(\text{HCN})_{n=3-8}$

شکل ۴-۳. رابطه‌ی میان چگالی بار در نقطه‌ی بحرانی پیوند و فاصله‌ی

۷۳ برهمکنش خوشه‌های $(\text{LiCN})_{n=3-8}$ (a) و $(\text{HCN})_{n=3-8}$ (b)

شکل ۴-۵. رابطه میان انرژی هم‌افزایی و تفاوت فاصله‌های برهمکنش ۷۸

شکل ۴-۶. ارتباط میان انرژی الکترواستاتیکی و انرژی کلی تریمرها ۷۹

شکل ۴-۷. ارتباط میان انرژی هم‌افزایی و چگالی در نقطه بحرانی پیوند $\text{Li} \dots \text{C}$ و $\text{Li} \dots \text{N}$ ۸۰

شکل ۴-۸. رابطه میان لاپلاسیان نقطه بحرانی پیوند و انرژی هم‌افزایی (HCN-HCN-YCN) (a)

۸۸ $\text{Y}=\text{H, Li, F, Cl, Br, I}$; (c) NCCN-HCN-YCN ; (b) FCN-HCN-YCN

شکل ۴-۹. رابطه میان انرژی برهمکنش کل و انرژی الکترواستاتیکی (HCN-HCN-YCN) (a)

۹۰..... Y=H, Li, F, Cl, Br, I ; (NCCN-HCN-YCN ; (b)FCN-HCN-YCN

۹۱..... شکل ۴-۱۰. ارتباط خطی میان انرژی برهمکنش کل با انرژی هم‌افزایی کمپلکس‌ها.

۹۳..... منابع

فصل اول

مقدمه ای بر سیستم محاسباتی

۱- فصل اول- مقدمه‌ای بر شیمی محاسباتی

۱-۱- مقدمه

شیمی یا کیمیا علمی از علوم پایه است و دارای گستره‌ی بسیار وسیعی می‌باشد. این علم به مطالعه‌ی اجزای تشکیل دهنده‌ی ماده، ویژگی‌ها، ترکیبات و واکنش‌های آنها می‌پردازد. به دنبال انجام این واکنش-ها، مواد دچار تغییراتی در ساختمان خود می‌شوند که چگونگی بوجود آمدن این تغییرات به کمک علم شیمی بررسی می‌گردد. علم شیمی با علوم مختلفی مانند زیست شناسی، فیزیک و زمین شناسی و... در ارتباط است، همچنین این علم با حوزه‌های مختلفی مثل پزشکی، داروسازی، علوم صنعتی همچون صنعت نفت، پتروشیمی، صنایع معدنی و... رابطه‌ی نزدیک دارد. از این رو در بسیاری از رشته‌های تحصیلی، گرایش‌های مختلف علم شیمی وجود دارد.

شاخه‌های اصلی علم شیمی عبارت‌اند از:

- ۱) شیمی تجزیه: این علم به بررسی و تعیین ترکیبات و اجزای تشکیل دهنده‌ی آنها می‌پردازد.
- ۲) شیمی آلی: شیمی آلی علمی است که به مطالعه‌ی ترکیبات کربن‌دار می‌پردازد.
- ۳) شیمی معدنی: مطالعه‌ی بیشتر، درباره‌ی ویژگی‌هایی از عناصر مانند ویژگی‌های ساختاری که در شیمی آلی بررسی در مورد آنها امکان پذیر نمی‌باشد، در شیمی معدنی صورت می‌گیرد.
- ۴) شیمی فیزیک: شیمی در کنار فیزیک به تشریح ماهیت درونی مواد می‌پردازد. می‌توان گفت که شیمی فیزیک شاخه‌ای از علم شیمی است که سعی در مطالعه‌ی ویژگی‌های فیزیکی مواد بر پایه‌ی خواص شیمیایی آنها دارد [۱و۲].

۱-۲- شیمی کوانتومی

شیمی کوانتومی از گرایش‌های شیمی فیزیک می‌باشد که سعی در حل معادله‌ی شرودینگر برای سیستم-های شیمیایی دارد. بسیاری از ویژگی مولکول‌ها مانند طول پیوند، زاویه‌ی پیوندی ایجاد شده، قطبیت پیوندها،

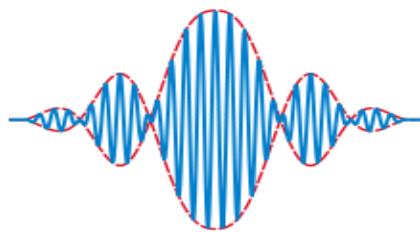
قطبیت مولکول و طیف‌های مولکولی توسط شیمی کوانتومی مطالعه می‌شوند [۳].

۱-۳- معادله‌ی شرودینگر

به کمک معادله‌ی شرودینگر شکل ریاضی به مسائل شیمی داده می‌شود و مسائل مربوط به مولکول‌های بس ذره‌ای با دقت بیشتری حل می‌شوند. این معادله به صورت حاصل ضرب هامیلتونین در یک تابع موج Ψ (سای)، که به شکل معادله‌ی (۱-۱) می‌باشد، برای یک سیستم نوشته می‌شود. معادله‌ی شرودینگر به تشریح مولکول از نظر انرژی، چگونگی تغییر حالت‌های کوانتومی یک پدیده‌ی فیزیکی در طول زمان و دیگر ویژگی‌های آن مولکول می‌پردازد. معادله‌ی شرودینگر در اوایل سال ۱۹۲۶ توسط فیزیکدان اتریشی اروین شرودینگر فرمول بندی شد و توسعه یافت:

$$H\Psi = E \Psi \quad (1-1)$$

بر طبق این معادله، حرکت الکترون به یک مدار دایره‌ای شکل محدود نمی‌شود بلکه این حرکت در یک فضای سه بعدی صورت می‌گیرد. پس بر اساس این معادله، الکترون رفتار دوگانه‌ی ذره‌ای- موجی خواهد داشت. این رفتار دو گانه‌ی الکترون را می‌توان در شکل (۱-۱) مشاهده نمود.



شکل ۱-۱. حرکت ذره‌ای- موجی الکترون

در سال‌های بعد دانشمندانی مانند روبرت اوپنهاইمر و فریتز لاندن با انتشار مقالات خود در تأیید این مسئله، علم شیمی کوانتومی را بنیانگذاری کردند. اولین راه در حل مسئله‌ی شیمی کوانتومی، حل معادله‌ی شرودینگر است. معادله‌ی شرودینگر را نمی‌توان به صورت دقیق برای اتم‌های سنگین حل نمود و باید در جستجوی راه حل‌های تقریبی برای حل معادلات اتم‌های سنگین بود. حل دقیق معادله‌ی شرودینگر را تنها می‌توان برای اتم

هیدروژن که فقط یک الکترون در مدار خود دارد، بدست آورد. با حل معادله‌ی شرودینگر برای الکترون اتم هیدروژن، تعدادی توابع موج حاصل می‌شود که هر یک از این توابع، مربوط به تراز انرژی خاصی برای الکترون می‌باشند و نشان دهنده‌ی ناحیه‌ای هستند که احتمال حضور الکترون در آنجا بیشتر است. پس می‌توان گفت تابع موج یک الکترون بیان‌گر اوربیتال آن الکترون است. با استفاده از نتایج حاصل از بررسی اتم هیدروژن، بررسی دقیق‌تری از رفتار الکترون‌ها در اتم‌های سنگین که شامل حرکات دو ذره یا چند ذره‌ای هستند، بدست می‌آید [۳-۵].

۱-۴- شیمی محاسباتی

شیمی محاسباتی (که مدل‌سازی مولکولی نیز نامیده می‌شود) دانشی است که به کمک مجموعه‌ای از روش‌ها، سعی در حل مسائلی چون پیش بینی ساختار مولکولی، تعیین خواص مولکولی، تعیین سرعت انجام واکنش‌های شیمیایی و انرژی مورد نیاز برای عبور از حالت گذار کمپلکس‌ها با کمک رایانه دارد. در حالی که نتایج حاصل از آن معمولاً مکمل اطلاعات بدست آمده از آزمایش‌های تجربی می‌باشند، اما در بعضی از موارد به پیش بینی پدیده‌های مشاهده نشده‌ی شیمیایی منجر می‌شود. پس شیمی محاسباتی می‌تواند به شیمی تجربی کمک کرده و در یافتن موضوعات جدید شیمیایی با شیمی تجربی رقابت کند.

شیمی محاسباتی شامل مدل‌سازی مولکولی، روش‌های محاسباتی، طراحی مولکول به کمک رایانه و نیز داده‌های شیمیایی و طراحی سنتزهای آلی می‌باشد. از این رشته به طور وسیع در رشته‌های شیمی، بیوشیمی، طراحی داروها، کاتالیست‌ها و مواد جدید استفاده می‌شود چرا که در این موارد پیش بینی دقیق ویژگی‌های فیزیکی مواد الزامی است. در مدل‌سازی، هر چه جزئیات بیشتری از سیستم مانند طول و زوایای پیوندی گروه-های متصله، اطلاعات مورد نیاز مربوط به سیستم مثل دما، فشار و... گنجانده شود از نظر رفتار، شباهت بیشتری به سیستم واقعی پیدا خواهد کرد. با پیشرفت علم، مدل‌سازی مولکولی در سیستم‌های با ساختار پیچیده‌تر کاربرد بیشتری خواهد داشت [۶].

۱-۴-۱- انواع روش‌های محاسباتی

شیمی محاسباتی عموماً به دو روش انجام می‌شود:

الف: مکانیک مولکولی^۱ ب: مکانیک کوانتومی^۲

۱-۴-۱-۱- مکانیک مولکولی

در مکانیک مولکولی قوانین اولیه‌ی فیزیک برای مطالعه‌ی هسته‌ی مولکول‌ها بدون در نظر گرفتن الکترون‌ها بکار می‌روند. تنها مولکول‌های بسیار بزرگ زیستی مانند پروتئین‌ها، استروئیدها و یا DNA با مکانیک مولکولی مورد مطالعه قرار می‌گیرند، زیرا روش‌های دیگر (مکانیک کوانتومی) بر اساس معادله‌ی شرودینگر بوده و حل این معادله برای چنین ساختارهایی بیش از حد زمان‌بر خواهد بود [۶].

از انواع روش‌های مکانیک مولکولی می‌توان به روش‌هایی نظیر روش CHARMM، UFF، AMBER و غیره اشاره کرد. از مزایای مکانیک مولکولی این است که (۱) برای بررسی ساختارهایی که شامل تعداد بیشتری از اتم‌ها هستند، بسیار مفید است. (۲) محاسبات آن زمان کمتری نیاز دارند. از جمله معایب مکانیک مولکولی نیز می‌توان گفت که (۱) برهمکنش‌های الکترونی را در نظر نمی‌گیرد. (۲) قادر نیست برهمکنش‌های تشکیل و شکستن پیوندها را در محاسبات اعمال کند. (۳) اطلاعاتی درباره خواص و واکنش‌پذیری در اختیار محاسبه کننده قرار نمی‌دهد. (۴) پارامترهای تجربی زیادی وجود دارند که باید به دقت آزمایش شوند. (۵) این روش، اطلاعاتی در مورد چگونگی توزیع الکترون‌ها در اختیار قرار نمی‌دهد [۶].

۱-۴-۱-۲- مکانیک کوانتومی

مکانیک کوانتومی که فیزیک کوانتومی یا نظریه‌ی کوانتومی نیز گفته می‌شود، یکی از شاخه‌های فیزیک نظری است که پدیده‌های فیزیکی را در مقیاس میکروسکوپی و یا در سرعت‌های بسیار بالا مطالعه می‌کند. از مکانیک کوانتومی جهت شناسایی دقیق ساختار مولکول طبق اجزای تشکیل دهنده‌ی آن (الکترون‌ها، پروتون‌ها،

^۱ Molecular Mechanics (MM)

^۲ Quantum Mechanics (QM)