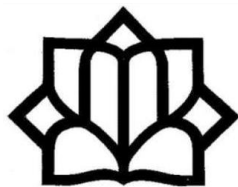


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه کاشان
دانشکده شیمی
گروه شیمی فیزیک

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد
در رشته‌ی شیمی فیزیک

عنوان:

**بررسی محاسباتی برهمکنش اسیدهای آمینه با نانومخروط بور
نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین دار شده**

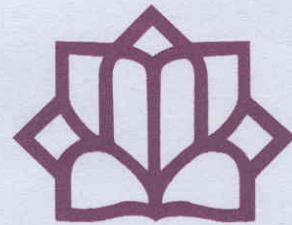
استاد راهنما:

دکتر زهرا توانگر

توسط:

زهرا طاهریان آرانی

دی ماه 1392



دانشگاه کاشان
دانشکده شیمی

بسمه تعالی

تاریخ:
شماره:
پوست:

مدیریت تحصیلات تکمیلی دانشگاه

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

نام و نام خانوادگی دانشجو: زهرا طاهریان

شماره دانشجویی: ۹۰۱۵۵۶۰۰۰۹

رشته: شیمی

دانشکده: شیمی

عنوان پایان نامه: " بررسی محاسباتی برهمکنش اسیدهای آمینه با نانومخروط

بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین دار شده "

این پایان نامه به مدیریت تحصیلات تکمیلی به منظور بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد ارائه می گردد. دفاع از پایان نامه در تاریخ

۹۲/۱۰/۳۰ مورد تأیید و ارزیابی هیأت داوران قرار گرفت و با نمره

به عدد: ۱۹٫۵ و درجه عالی به تصویب رسید.

به حروف: نوزده و نیم

اعضای هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما:	دکتر زهرا توانگر	استادیار	
۲. متخصص و طلب نظر دایم دانشگاه:	دکتر مسعود همدانیان	دانشیار	
۳. متخصص و طلب نظر دایم دانشگاه:	دکتر عادل ریسی	استادیار	
۴. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه:	دکتر مسعود همدانیان	دانشیار	

منصوباً
مدیر تحصیلات تکمیلی

آدرس: کاشان - بلوار قطب روانی

کد پستی: ۸۷۳۱۷ - ۵۱۱۶۷

تلفن: ۵۱۱۲۳۹۷ - ۵۱۱۲۳۹۷ - ۵۱۱۲۳۹۷

<http://www.kashanu.ac.ir>

تقدیرم به

پدرم به استواری کوه

مادرم به زلالی چشمه

همسرم به صمیمیت باران

تشکر و قدردانی

حمد و سپاس خدای را که توفیق کسب دانش و معرفت را به ما عطا فرمود. در اینجا بر خود لازم می‌دانم از تمامی اساتید بزرگوار بویژه اساتید دوره‌ی کارشناسی ارشد که در طول سالیان گذشته مرا در تحصیل علم و معرفت و فضائل اخلاقی یاری نموده‌اند تقدیر و تشکر نمایم.

از استاد گرامی و بزرگوار **سرکار خانم دکتر زهرا توانگر** که راهنمایی اینجانب را در این تحقیق، پژوهش و نگارش این پایان‌نامه تقبل نموده‌اند نهایت تشکر و سپاسگزاری را دارم. از **جناب آقای دکتر مسعود همدانیان** و **جناب آقای دکتر عادل رئیسی** بعنوان استاد داور داخل دانشگاه که این پایان‌نامه را مورد مطالعه قرار دادند و در جلسه‌ی دفاعیه شرکت نموده‌اند سپاسگزاری می‌نمایم.

در پایان از **جناب آقای دکتر مسعود همدانیان** که به عنوان نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی دانشگاه قبول زحمت نمودند سپاسگزاری می‌نمایم.

چکیده

امروزه استفاده از فناوری نانو در تمامی جنبه‌های زندگی بشر، امری غیر قابل انکار است و وجود آن در عصر حاضر در تمامی علوم احساس می‌شود. در این تحقیق با توجه به پتانسیل ساختارهای نانو در به‌کارگیری در سامانه‌های زیستی و با توجه به میزان سمیت بسیار پایین و پایداری شیمیایی بالای ساختارهای بور نیتریدی، از نانو ساختارهای مخروطی شکل بور نیتریدی بهره گرفته و با استفاده از محاسبات کوانتومی به بررسی برهمکنش بین نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده با برخی آمینواسیدها پرداخته شد. در محاسبات کوانتومی انجام شده، از روش B3LYP/DFT با مجموعه پایه‌ی 6-311+G(d) برای بهینه‌سازی ساختارهای هندسی و از مجموعه پایه‌ی 6-311G به منظور محاسبات فرکانس استفاده شد.

بر اساس نتایج بدست آمده از محاسبات بهینه‌سازی و محاسبات فرکانس، بهترین انرژی برهمکنش بین آمینواسید و نانومخروط بدست می‌آید. در این پژوهش بر اساس اختلاف انرژی آزاد گیبس سامانه‌ها، مشخص شد در فاز آبی، بهترین برهمکنش بین آمینواسید سرین با نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار وجود دارد و در فاز گازی به ترتیب آمینواسیدهای آلانین و گلیسین بهترین برهمکنش را با نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده برقرار می‌کنند. در ادامه، کمیت‌های ترمودینامیکی و سطوح انرژی اوربیتال‌های HOMO و LUMO و رسانایی و میزان نشر الکترون در کلیه‌ی سامانه‌ها در فازهای آبی و گازی مورد بررسی قرار گرفته است.

کلمات کلیدی: (1) نانومخروط (2) آمینواسید (3) محاسبات کوانتومی (4) نظریه تابعیت

چگالی (5) انرژی برهمکنش

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول: مبانی نظری

3	1-1- مکانیک کوانتومی
5	1-1-1- روش‌های نیمه تجربی
5	1-2-1- روش‌های از اساس
6	1-2-1-1- روش میدان خودسازگار هارتری-فاک (SCF-HF)
8	1-2-1-1- نظریه تابعیت چگالی (DFT)
11	2-1- مجموعه پایه
14	3-1- خطای پوش مجموعه پایه (BSSE)
16	4-1- بهینه‌سازی ساختار هندسی
17	5-1- فرکانس‌های ارتعاشی مولکولی
19	6-1- اثرات حلال
21	1-6-1- انرژی آزاد گیبس حلال پوشی
23	2-6-1- روش PCM
25	7-1- نانومخروط‌ها
26	1-7-1- ساختار نانومخروط‌ها
28	2-7-1- روش‌های تولید نانومخروط‌های بور نیتریدی

- 30 1-7-3- ویژگی‌ها و کاربردهای نانومخروط‌های بور نیتریدی
- 31 1-8- مروری بر مطالعات پیشین

فصل دوم: بخش محاسباتی

- 35 2-1- نانومخروط بور نیتریدی 240°
- 37 2-2- آمینواسید
- 38 2-3- نرم‌افزار
- 39 2-4- محاسبات
- 39 2-4-1- محاسبات بهینه‌سازی
- 40 2-4-2- محاسبات فرکانسی
- 41 2-5- برهمکنش آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی
- 48 2-6- برهمکنش آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده
- 57 2-7- تصحیح خطای پوش سری پایه

فصل سوم: بحث و نتایج

- 60 3-1- بررسی برهمکنش بین نانومخروط بور نیتریدی و فلز پلاتین
- 61 3-2- بررسی جذب آمینواسید توسط نانومخروط
- 63 3-3- بررسی کمیت‌های ترمودینامیکی
- 71 3-4- اوربیتال‌های مرزی در برهمکنش بین آمینواسید و نانومخروط

82 3-5- نتیجه گیری

85 مراجع

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
41	جدول 2-1: تعداد الکترون‌های آلفا، بتا و مجموعه توابع پایه در کلیه سیستم‌ها
44	جدول 2-2: ممان دوقطبی (دبای) و انرژی الکترونی (هارتری) سامانه‌های BNNC و BNNC-A و آمینواسیدها در دمای 298/15 K در دو فاز گازی و آبی، بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d)
45	جدول 2-3: طول پیوندهای مربوط به پیوندهای درون مولکولی نانومخروط بور نیتریدی بهینه‌شده با روش DFDT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d)، در محیط گازی و آبی در دمای 298/15 K
45	جدول 2-4: زوایای پیوندی مربوط به پیوندهای درون مولکولی نانومخروط بور نیتریدی بهینه‌شده با روش DFDT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d)، در محیط گازی و آبی در دمای 298/15 K
48	جدول 2-5: ممان دوقطبی (D) و انرژی الکترونی (a.u) سامانه‌های BNNC-Pt و BNNC-Pt با آمینواسیدها در دمای 298/15 K در دو فاز گازی و آبی
49	جدول 2-6: طول پیوندهای مربوط به پیوندهای درون مولکولی نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه مطلوب، در محیط گازی و آبی در دمای 298/15 K
50	جدول 2-7: زوایای پیوندی مربوط به پیوندهای درون مولکولی نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه مطلوب، در محیط گازی و آبی در دمای 298/15 K
56	جدول 2-8: انرژی نقطه‌ی صفر (ZPE) (a.u) در سیستم جاذب آمینواسید - نانومخروط در دمای 298/15 K در دو فاز گازی و آبی
57	جدول 2-9: انرژی نقطه‌ی صفر (ZPE) (a.u) در سیستم جاذب آمینواسید - نانومخروط پلاتین‌دارشده در دمای 298/15 K در دو فاز گازی و آبی

- جدول 2-10: مقادیر BSSE (a.u) برای سامانه‌های BNNC با آمینواسیدها و BNNC-Pt
 57 با آمینواسیدها در فاز گازی و آبی
- جدول 3-1: انرژی برهمکنش (kJ/mol) بین آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی و
 62 نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده در دمای 298/15 K در فاز گازی و آبی
- جدول 3-2: انرژی برهمکنش با تصحیح انرژی (kJ/mol) بر اساس BSSE و ZPE، مربوط
 63 به سامانه‌ی آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی
 پلاتین‌دار شده در دمای 298/15 K در فازهای گازی و آبی
- جدول 3-3: اعداد موجی مربوط به رأس مخروط به همراه شدت سیگنال‌ها در سامانه‌های
 64 BNNC و BNNC-Pt بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی مطلوب
 در فاز گازی و آبی و دمای 298/15 K
- جدول 3-4: اعداد موجی شدید مربوط به سامانه‌های نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور
 65 نیتریدی پلاتین‌دار شده و آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی بهینه شده در فاز
 گازی و آبی با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی مطلوب در دمای 298/15 K ...
- جدول 3-5: اعداد موجی شدید در سامانه‌های BNNC-Pt-A، بهینه شده با روش
 66 DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی مطلوب در دمای 298/15 K در فاز گازی و
 آبی
- جدول 3-6: کمیت‌های انرژی داخلی و انرژی آزاد گیبس (a.u)، ظرفیت گرمایی و آنتروپی
 68 (cal/mol.K) در برهمکنش بین آمینواسیدها با BNNC و BNNC-Pt بهینه شده
 با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی مطلوب در فازهای گازی و آبی در
 دمای 298/15 K
- جدول 3-7: تغییرات انرژی آزاد گیبس (Kcal/mol) و تغییرات آنتروپی (cal/mol.K) مربوط به
 69 برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده با
 آمینواسیدها در فازهای گازی و آبی در دمای 298/15 K
- جدول 3-8: انرژی اوربیتال‌های HOMO و LUMO (ev) و اختلاف انرژی بین اوربیتال‌های
 72 LUMO و HOMO (HLG) (ev) در نانومخروط بور نیتریدی و نانومخروط بور
 نیتریدی پلاتین‌دار شده در فاز گازی و آبی

جدول 9-3: مقدار پتانسیل شیمیایی و سختی شیمیایی (ev) برای سامانه‌های BNNC،
74 BNNC-Pt، BNNC-A و BNNC-Pt-A در دو فاز گازی و آبی

فهرست شکل‌ها

- شکل 1-1: (a) نانومخروط بور نیتریدی 120^0 -mol-B. (b) نانومخروط بور نیتریدی
28 120^0 -Zig-B
- شکل 1-2: ساختار نانومخروط بور نیتریدی $B_{34}N_{34}H_{12}$ از نمای بالا (راست) و روبرو
36 (چپ)
- شکل 2-2: ساختار بهینه‌شده‌ی مولکول (a) گلايسين (b) آلانين (c) سرين در فاز گازی
(بالا) و فاز آبی (پایین) با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی
43 6-311+G(d)
- شکل 3-2: ساختار نانومخروط بور نیتریدی بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و
46 مجموعه پایه 6-311+G(d) در دمای 298/15 K
- شکل 4-2: ساختار بهینه شده‌ی آمینواسیدها با نانومخروط بور نیتریدی با روش
DFT/B3LYP و مجموعه پایه‌ی 6-311+G(d) در فاز گازی (راست) و فاز
47 آبی (چپ) (a) BNNC-gly (b) BNNC-ala (c) BNNC-ser
- شکل 5-2: ساختار نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP
51 و مجموعه پایه‌ی مطلوب در دمای 298/15 K
- شکل 6-2: ساختار کمپلکس‌های BNNC-Pt-A، بهینه‌شده با روش DFT/B3LYP و
مجموعه پایه مطلوب در دمای 298/15 K، در فاز گازی (راست) و فاز آبی
BNNC-Pt-ser BNNC- (c) BNNC-Pt-ala (b) BNNC-Pt-gly (a) (چپ)
52 Pt-ser
- شکل 7-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی و گلايسين، بهینه شده
با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d) در دمای 298/15 K
53 در فاز گازی (بالا) و آبی (پایین)
- شکل 8-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده و
گلايسين، بهینه شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه مطلوب در

- 54 دمای 298/15 K در فاز گازی (بالا) و فاز آبی (پایین)
- شکل 9-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی و آلانین، بهینه شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d) در دمای 298/15 K در فاز گازی (بالا) و فاز آبی (پایین) 54
- شکل 10-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده و آلانین، بهینه شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه مطلوب در دمای 298/15 K در فاز گازی (بالا) و فاز آبی (پایین) 55
- شکل 11-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی و سرین، بهینه شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G(d) در دمای 298/15 K در فاز گازی (بالا) و فاز آبی (پایین) 55
- شکل 12-2: طیف IR مربوط به سامانه‌ی نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده و سرین، بهینه شده با روش DFT/B3LYP و مجموعه پایه مطلوب در دمای 298/15 K در فاز گازی (بالا) و فاز آبی (پایین) 56
- شکل 1-3: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و فاز آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در نانومخروط بور نیتریدی در فاز گازی (راست) و فاز آبی (چپ) 75
- شکل 2-3: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و فاز آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده در فاز گازی (راست) و فاز آبی (چپ) 76
- شکل 3-3: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی با گلایسین (پایین) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 77
- شکل 4-3: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده با گلایسین در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 78

- شکل 3-5: اوربیتال‌های HOMO (بالا) فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش‌های نانومخروط بور نیتریدی با آلانین در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 79
- شکل 3-6: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده با آلانین در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 80
- شکل 3-7: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی با سرین در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 81
- شکل 3-8: اوربیتال‌های HOMO (بالا) در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) و اوربیتال‌های LUMO (پایین) در برهمکنش نانومخروط بور نیتریدی پلاتین‌دار شده با سرین در فاز گازی (راست) و آبی (چپ) 82

فهرست علائم و اختصارات (Abbreviation)

PM3	Parameterized Model Number 3
AM1	Austin Model 1
MNDO	Modified Neglect Of Differential Overlap
SCF-HF	Self Consistent Field – Hartree Fock
CI	Configuration Interaction
CS	Coupled Cluster
DFT	Density Functional Theory
KS	Kohen – Sham
DZ	Double - Zeta
BSSE	Basis Set Superposition Error
ZPE	Zero Point Energy
SCRF	Self Consistent Reaction – Field
ASC	Apparent Surface Charge
PCM	Polarizable – Continuum Model
IPCM	Isodensity Polarizable – Continuum Model
SCIPCM	Self Consistent Iso Density Polarizable – Continuum Model
IEFPCM	Integral Equation Formulation Polarizable – Continuum Model
BNNC	Boron Nitride NanoCone
SWBNNC	Single Wall BNNC
MWBNNC	Multi Wall BNNC
HOMO	Highest Occupied molecular Orbital
LUMO	Lowest Occupied molecular Orbital
HLG	HOMO-LUMO Gap

فصل اول



مبانی نظری

شیمی محاسباتی، شاخه‌ای از دانش شیمی است که سعی در حل مسائل شیمی با کمک رایانه‌ها دارد و هدف اصلی آن محاسبه‌ی خواص مولکول‌ها (از جمله انرژی کل، گشتاور دو قطبی، فرکانس‌های ارتعاشی و ...) می‌باشد. در این رشته از نتایج شیمی محض که در قالب برنامه‌های مؤثر کامپیوتری درآمده‌اند برای محاسبه‌ی ساختار و خواص مولکول‌ها استفاده می‌شود، در حالی که نتایج آن معمولاً کامل‌کننده‌ی اطلاعات بدست آمده از آزمایش‌های شیمیایی هستند. گاهی از شیمی محاسباتی برای پیش‌گویی در مورد مولکول‌ها یا واکنش‌های جدید که بعدها به طور تجربی بررسی می‌شوند، استفاده می‌شود. همچنین بسیاری از محققین از این روش برای طراحی مولکول‌ها به کمک کامپیوتر و داده‌های شیمیایی و طراحی سنتزهای آلی، داروها، کاتالیزورها و مواد نو بهره می‌گیرند. تکنیک‌های محاسباتی برای ترکیب‌های ناپایدار و حتی برای ترکیب‌هایی که هنوز شناخته نشده‌اند، نیز قابل استفاده است. در واقع، مطالعه و بررسی حرکت ذرات میکروسکوپی، مانند هسته‌ها و الکترون‌ها را نمی‌توان بر اساس قوانین مکانیک کلاسیک توجیه نمود. از این رو، بررسی و مطالعه‌ی حرکت این ذرات با کمک مکانیک کوانتوم انجام پذیرفت. شیمی کوانتوم، قوانین مکانیک کوانتوم را در مسائل مربوط به

شیمی مورد استفاده قرار می‌دهد. شیمی محاسباتی به دو دسته‌ی مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتوم تقسیم می‌شود که قوانین مکانیک کوانتومی برای بررسی و توجیه حرکت ذرات میکروسکوپی به کار می‌رود [1 و 2].

1-1- مکانیک کوانتومی

مکانیکی که سیستم‌های میکروسکوپی از آن پیروی می‌کنند، مکانیک کوانتومی نامیده می‌شود، زیرا یکی از جنبه‌های شاخص این مکانیک، کوانتش انرژی است. قوانین مکانیک کوانتومی به وسیله‌ی هایزنبرگ¹، بورن² و جوردن³ [3] در سال 1925 و به وسیله‌ی شرودینگر⁴ [4] در سال 1926 بیان شد. حالت یک سیستم مکانیک کوانتومی به وسیله‌ی تابع حالت Ψ ، که تابعی از مختصات ذرات و زمان است، توصیف می‌شود.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H} \quad (1-1)$$

در این معادله \hat{H} عملگر هامیلتونی مکانیک کوانتومی است که با کمیت کلاسیکی انرژی مطابقت دارد. نقش معادله‌ی شرودینگر در مکانیک کوانتومی مانند قانون دوم نیوتن در مکانیک کلاسیک است. هنگامی که انرژی پتانسیل V مستقل از زمان باشد، سیستم می‌تواند در یکی از حالت‌های ایستاده‌ای که برای آن میسر است، قرار گیرد. برای یک حالت ایستاده، تابع حالت به صورت $\Psi_n = \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$ است. تابع موج مستقل از زمان Ψ_n ، تابعی از مختصات ذرات است که موقعیت‌ها و حرکت‌های ذرات سیستم را توصیف می‌کند و یکی از جواب‌های خوش رفتار معادله‌ی مستقل از زمان شرودینگر است که در آن انرژی سیستم می‌باشد. برای یک سیستم مولکولی، تمام خواص مولکولی از حل معادله‌ی شرودینگر مولکولی قابل محاسبه است. عملگر هامیلتونی برای این سیستم‌ها به صورت زیر است:

$$\hat{H}_e = \hat{K}_N + \hat{K}_e + \hat{V}_{NN} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} \quad (2-1)$$

¹ Heisenberg

² Born

³ Jourdan

⁴ Schrodinger

که در آن \hat{K}_e و \hat{K}_N به ترتیب عملگرهای انرژی جنبشی برای هسته‌ها و الکترون‌ها و \hat{V}_{NN} و \hat{V}_{Ne} و \hat{V}_{ee} به ترتیب انرژی پتانسیل دافعه‌ی بین هسته‌ها، جاذبه بین الکترون‌ها و هسته‌ها و دافعه‌ی بین الکترون‌هاست. با این عملگر هامیلتونی، حل معادله‌ی شرودینگر بسیار پیچیده است و برای حل آن نیاز به استفاده از تقریب‌های گوناگون داریم. یکی از این تقریب‌ها، تقریب بورن - اپنهایمر است. ماکس بورن و روبرت اپنهایمر نشان دادند که بررسی جداگانه‌ی حرکت‌های الکترونی و هسته‌ای یک تقریب بسیار خوب است. هسته‌ها به علت جرم بسیار زیادتر نسبت به الکترون‌ها، خیلی آهسته‌تر از الکترون‌ها حرکت می‌کنند و در مدت زمانی که هسته‌ها فاصله‌ی کوتاهی را طی می‌کنند، الکترون‌ها تعداد زیادی از چرخه‌های حرکتی را انجام می‌دهند، لذا توزیع الکترون‌ها درون یک سیستم مولکولی به موقعیت هسته‌ها و نه به سرعت آنها بستگی دارد. با این تقریب، معادله‌ی شرودینگر را می‌توان مطابق زیر نوشت [4]:

$$\hat{H}_{ele}(r, R)\psi_{ele}(r, R) = E_{ele}(r)\psi_{ele}(r, R) \quad (3-1)$$

که در آن \hat{H}_{ele} و ψ_{ele} و E_{ele} به ترتیب عملگر هامیلتونی، تابع موج و انرژی الکترونی است. هامیلتونی الکترونی از حذف عملگر انرژی جنبشی هسته‌ای از هامیلتونی کل بدست می‌آید و برابر است با :

$$\hat{H}_{ele} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \sum_{i=1}^n \sum_{I=1}^N \frac{Z_i}{|R_I - r_i|} + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{I=1}^N \sum_{J>I}^N \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|} \quad (4-1)$$

که در آن جمله‌ی اول، عملگر انرژی جنبشی n الکترون، جمله‌ی دوم عملگر انرژی پتانسیل جاذبه‌ی n الکترون با N هسته، جمله سوم انرژی پتانسیل دافعه‌ی بین n الکترون و جمله‌ی چهارم، انرژی پتانسیل دافعه‌ی بین N هسته می‌باشد. انرژی دافعه‌ی بین هسته‌ای در معادله‌ی بالا ثابت است، چون در این تقریب، مواضع هسته‌ها ثابت در نظر گرفته می‌شود.