بسم الله الرحمن الرحيم

همه امتیازهای این پایان نامه به دانشگاه بوعلی سینا همدان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه بوعلی سینا (یا استاد یا استادان راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر مآخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشکـده شیمی
گروه شیمی فیزیک

پایان‌نامه:
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

مطالعه بر هم کنش‌های بین مولکولی الکلها و ترکیبات آلی با روش‌های مکانیک کوانتومی

استاد راهنما:
دکترحسینعلی زارعی

پژوهشگر:
مهشید مهرآرا

اسفند1388

دانشکـده شیمی
گروه شیمی فیزیک

پایان‌نامه:
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

مطالعه بر هم کنش‌های بین مولکولی الکلها و ترکیبات آلی با روش‌های مکانیک کوانتومی

استاد راهنما:
دکترحسینعلی زارعی

پژوهشگر:
مهشید مهرآرا

کمیته ارزیابی پایان‌نامه:

1- استاد راهنما: **دکتر حسینعلی زارعی**.....دانشیار شیمی فیزیک

2- استاد مدعو: **پروفسور حسین ایلوخانی**..... استاد شیمی فیزیک

3- استاد مدعو: **دکتر فخری کرمانپور**..... استادیار شیمی فیزیک

دانشکـده شیمی

جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی ارشد
خانم مهشید مهرآرا در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

مطالعه بر هم کنش‌های بین مولکولی الکلها و ترکیبات آلی با روش‌های مکانیک کوانتومی

به ارزش 8 واحد در روز یکشنبه 1388/12/16 ساعت 14 بعد از ظهر در سالن آمفی تئاتر 2 دانشکده شیمی و با حضور اعضای هیأت داوران زیر برگزار گردید و با نمره ..... و درجه ..... به تصویب رسید.

هیأت داوران:

1- استاد راهنما: **دکتر حسینعلی زارعی**.....دانشیار شیمی فیزیک

2- استاد مدعو: **پروفسور حسین ایلوخانی**..... استاد شیمی فیزیک

3- استاد مدعو: **دکتر فخری کرمانپور**..... استادیار شیمی فیزیک

سپاسگزاری:

سپاس مخصوص خدایی است که خود را به ما شناساند و شکر خود را به ما الهام کرد و درهای پروردگاریش را به روی ما گشود و ما را به روی توحید خالص خود راهنمایی کرد و از شک و کپرروی در کار خود دور کرد.

سپاس که تا زنده ایم هزو سپاسگزاران او باشیم و هنگامی که عمر به پایان رسید به روی خشنودی و گذشت او بشتابیم.

سپاس از تمام کسانی که نوشتن را آموختند و نام معلم را که زمینه ترین نامهاست برای خود برگزیدند، شاید بتوانم به این وسیله از زحمات بی دریغشان قدردانی کنم و بگویم که هرگز فراموش نخواهند شد.

وظیفه خود می دانم صمیمانه ترین سپاس ها و تشکرهایم را تقدیم کنم به استاد راهنمای ارجمند و گرامی ام جناب آقای دکتر حمیدرضا علی زارعی، چرا که بدون صبر و حوصله و دلسوزی های بی دریغ و راهنمایی های سودمند ایشان انجام این تحقیق غیرممکن بود.

با تشکر از کلیه اساتید گرانقدر گروه شیمی فیزیک و سایر اساتیدی که افتخار شاگردی آنها را دارم، دوستان و هم کلاسی های ارجمندم با تمری، سلیمانی، حیدری، سرمست، رشیدی، عباسی، عظیمی، بهروزی، ارشیری، قاسمیان، ملکی، جعفری، نیکنام، فریدونی، بهادری، یوسفی، حاجیان، امراز که دوره کارشناسی ارشد را در صمیمانه ایشان سپری کرده ام و هریک به نوبه خود در عمیق ترین و لطیف ترین خاطراتم برجسته و تمام کسانی که دیم لطفشان شریم دل انگیز صحبت را در دل و جان من زنده نگه داشته است و تنها می توانم آرزوی روزهای خوبی را برای آنها داشته باشم که هیچ گاه نام یکایک آنها در این قدردانی نیست.

در نهایت سپاس از همیاری دهنده ای که وسعت بی پایان اش حق به قدر ذره ای را به سپاس ابدی مونث نمود.

با تمام اخلاص و احساسات خالصانه ام تقدیم می دارم به:

اولین و عزیزترین استادم، **پدرم**

و فرشته جاودان زندگیم، **مادرم**

که اشتیاق نگاهشان و تعالی روح بزرگ همیشه بانشان در سراسر زندگانیم، خاطرم را آرام و عزمم را طولانی کرد.

و

دوست داشتنی ترین قطعه قلبم خواهر عزیزم

و

دو برادر عزیزتر از جانم که پشتوانه ی زندگی من می باشد.

و همه آنانکه دوستشان دارم.

دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات رساله/ پایان نامه تحصیلی

عنوان: : مطالعه بر هم کنش‌های بین مولکولی الکلها و ترکیبات آلی با روش‌های مکانیک کوانتومی

نام نویسنده: مهشید مهرآرا

نام استاد: دکتر حسینعلی زارعی

دانشکده: شیمی	**گروه آموزشی: شیمی فیزیک**	
رشته تحصیلی: شیمی	**گرایش تحصیلی: شیمی فیزیک**	**مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد**
تاریخ تصویب:1387/6/31	**تاریخ دفاع:1388/12/16**	**تعداد صفحات:91**

چکیده

در این پروژه انرژی برهم‌کنش بین مولکولی برای هفت سیستم دوجزئی متان + هیدروژن سولفید، استونیتریل + آب و بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با استفاده از روش‌های مکانیک کوانتومی محاسبه شد. ساختارهای اولیه به وسیله روش‌های نیمه تجربی بهینه شد و خروجی به وسیله روش‌های از اساس به طور کامل بهینه شد. محاسبات فرکانس روی ساختارهای کامل بهینه شده انجام شد. این محاسبات نقاط ایستاده را تعیین می‌کند. سرانجام انرژی برهم‌کنش و تغییرات آن با افزایش طول زنجیره 1- آلکانول‌ها براساس روش محاسباتی و تابع پایه به کار رفته مورد بررسی قرار گرفت. انرژی برهم‌کنش بین مولکولی اساس بسیاری از معادلات ترمودینامیکی و مدل‌های ضریب فعالیت (NRTL و Wilson) است. در این پایان‌نامه انرژی‌های برهم‌کنش با روش‌های مکانیک کوانتومی محاسبه شد. آنتالپی‌های مولی فزونی توسط انرژی برهم‌کنش و مدل‌های NRTL و Wilson پیش‌بینی شدند. همچنین در سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها تصحیح خطای برهم‌نهی تابع پایه (BSSE) محاسبه و تأثیر آن بر روی انرژی برهم‌کنش بین مولکولی بررسی شد.

واژه‌های کلیدی: انرژی برهم‌کنش، آنتالپی مولی فزونی، GAUSSIAN، Mathematica ، NRTL وWilson

عنوان	فهرست مطالب	صفحه

مقدمه

فصل اول: روش‌های مکانیک کوانتومی و مروری بر کارهای گذشته

1-1- مکانیک کوانتومی 2
2-1 - انواع روش‌های نیمه تجربی 5
1-2-1-روش چشم پوشی کامل از همپوشانی دیفرانسیلی(CNDO)..... 5
2-2-1- روش صرف نظر متوسط از همپوشانی دیفرانسیلی(INDO) 6
3-2-1-روش صرف نظر متوسط اصلاح شده از همپوشانی دیفرانسیلی (MINDO)..... 6
4-2-1-روش صرف نظر اصلاح شده از همپوشانی دو اتمی (MNDO) 7
5-2-1-مدل استین1(AM1) 7
6-2-1-روش تصحیح شده AM1 (PM3)..... 8
3-1-روشهای از اساس 8
1-3-1- روش میدان خودسازگار هارتری – فاک 9
2-3-1-روش تابع چگالی (DFT)..... 13
3-3-1-روش اختلال 15
1-3-3-1-نظریه اختلال تک حالتی 15
2-3-3-1-نظریه اختلال مولر- پلست..... 16
4-1-توابع پایه 17
1-4-1-مجموعه پایه ظرفیتی شکافته(Split-valence) 20
2-4-1-مجموعه پایه پلاریزه 20
3-4-1-مجموعه پایه نفوذی(Diffuse basis set)..... 21
5-1- خطای برهم‌نهی مجموعه تابع پایه (BSSE)..... 22
6-1-محلول‌ها..... 23
1-6-1-محلول‌های ایده‌آل و غیر ایده‌آل..... 24
۱-6-2-محلول غیر ایده‌آل(non ideal solution)..... 24
7-1-.توابع فزونی 24
1-7-1-معادله ویلسون 25
2-7-1-مدل دو مایع غیر تصادفی 27

1-7-3- آنتالپی فزونی H^E، در مدل ضریب فعالیت.....28
1-7-3-1- تابع H^E مدل Wilson 28
1-7-3-2- تابع H^E مدل NRTL..... 28
1-8- مروری بر کارهای گذشته 29

فصل دوم: معرفی سیستم‌های مطالعه شده

2-1-مقدمه.....33
2-2- نرم افزارهای محاسباتی 33
2-3- سیستم متان + هیدروژن سولفید..... 34
2-4- سیستم استونیتریل + آب..... 34
2-5- سیستم بنزیل الکل+ 1- آلکانول‌ها(C_1-C_5)..... 35
2-5- 1-محاسبه خطای برهم‌نهی مجموعه تابع پایه (BSSE) در سیستم بنزیل الکل+
1-آلکانول‌ها 36
2-6- همبسته سازی داده‌ها..... 36
فصل سوم: محاسبه انرژی برهم‌کنش، بحث و نتیجه‌گیری
3-1- انرژی برهم‌کنش 38
3-2- بررسی و انجام محاسبات انرژی برهم‌کنش سیستم متان + هیدروژن سولفید 38
3-2-1- محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم متان + هیدروژن سولفید 38
3-2-2-محاسبه پارامترهای انرژی برهم‌کنش در معادلات NRTL و Wilson..... 39
3-2-3-نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم متان + هیدروژن سولفید 40
3-2-4-محاسبه آنتالپی مولی فزونی سیستم متان + هیدروژن سولفید با استفاده از
مدل NRTL 43
3-2-5-محاسبه آنتالپی مولی فزونی سیستم متان + هیدروژن سولفید با استفاده از
مدل Wilson 50
3-2-6-بحث و نتیجه‌گیری سیستم متان + هیدروژن سولفید 53
3-3-بررسی و انجام محاسبات انرژی برهم‌کنش استونیتریل + آب 54
3-3-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم استونیتریل + آب 54
3-3-2-محاسبه پارامترهای انرژی برهم‌کنش در معادلات NRTL و Wilson 54
3-3-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم استونیتریل + آب 55

3-3-4-محاسبه آنتالپی مولی فزونی سیستم استونیتریل + آب با استفاده از دو مدل Wilson و NRTL 56
3-3-5- بحث و نتیجه‌گیری سیستم استونیتریل + آب 58
3-4-بررسی و انجام محاسبات انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + آلکانول ها (C_1-C_5) 59
3-4-1-سیستم بنزیل الکل + متانول 59
3-4-1-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم متانول + بنزیل الکل 59
3-4-1-2-محاسبه پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم متانول + بنزیل الکل 60
3-4-1-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم متانول + بنزیل الکل 60
3-4-2-سیستم بنزیل الکل + اتانول 61
3-4-2-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم اتانول + بنزیل الکل 61
3-4-2-2-محاسبه پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم اتانول+بنزیل الکل 62
3-4-2-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم اتانول + بنزیل الکل 63
3-4-3-سیستم بنزیل الکل + 1- پروپانول 64
3-4-3-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پروپانول + بنزیل الکل 64
3-4-3-2-محاسبه پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پروپانول + بنزیل الکل 65
3-4-3-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پروپانول + بنزیل الکل 65
3-4-4-سیستم بنزیل الکل + 1- بوتانول 66
3-4-4-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم 1- بوتانول + بنزیل الکل 66
3-4-4-2-محاسبه پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- بوتانول + بنزیل الکل 67
3-4-4-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم 1- بوتانول + بنزیل الکل 67
3-4-5-سیستم بنزیل الکل + 1- پنتانول 68
3-4-5-1-محاسبه انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پنتانول + بنزیل الکل 68
3-4-5-2-محاسبه پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پنتانول + بنزیل الکل 69
3-4-5-3- نتایج انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پنتانول + بنزیل الکل 70
3-4-6-مقایسه انرژی برهم‌کنش در سیستم بنزیل الکل + آلکانولها (C_1-C_5) 71
3-4-7- محاسبه انرژی برهم‌کنش بامحاسبه خطای برهم‌نهی مجموعه تابع پایه 74
3-4-8- محاسبه آنتالپی مولی فزونی با استفاده ازمدل NRTL 77

3-4-9- بحث ونتیجه‌گیری آلکانولها + بنزیل الکل.....82

3-5- بحث و نتیجه گیری کلی 83

شکل1-1- مقایسه دقت اوربیتال‌های اسلیتری و گوسین با افزایش تعداد جملات در تابع گوسین 19
شکل1-2-دو نوع از شبکه‌ها یا بخش‌های مولکولی مایعات دوتایی 26
شکل3-1-ساختار بهینه شده در سطح نظری AM1، الف)یک مولکول هیدروژن سولفید و یک مولکول متان ب) دو مولکول هیدروژن سولفید ج) دو مولکول متان 39
شکل3-2- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روش HF 45
شکل3-3- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روش HF 45
شکل3-4- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روش B3lyp 47
شکل3-5- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روشB3lyp 47
شکل3-6- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روش MP2 49
شکل3-7- آنتالپی مولی فزونی متان + هیدروژن سولفید محاسبه شده با مدل NRTL و روش MP2 49
شکل3-8-ساختار بهینه شده استو نیتریل + آب در سطح نظری HF/6-311G..... 54
شکل3- 9- آنتالپیٔ مولی فزونی استونیتریل + آب محاسبه شده با مدل NRTL ..... .57
شکل3- 10- آنتالپی مولی فزونی استونیتریل + آب محاسبه شده با مدلWilson.....57
شکل3-11- ساختار بهینه شده در سطح نظری B3LYP/6-31++G FOPT ،
الف)متانول + بنزیل الکل، ب)دو مولکول متانول، ج)دو مولکول بنزیل الکل.....60
شکل3-12- ساختار بهینه شده در سطح نظری B3lyp/6-31++g FOPT،
الف)اتانول + بنزیل الکل، ب)دو مولکول اتانول، ج)دو مولکول بنزیل الکل.....62
شکل3-13- ساختار بهینه شده در سطح نظری B3lyp/6-31++g FOPT،
الف)1- پروپانول + بنزیل الکل، ب)دو مولکول 1- پروپانول ، ج)دو مولکول بنزیل الکل 64
شکل3-14- ساختار بهینه شده در سطح نظری B3LYP/6-31++g FOPT،
الف) 1- بوتانول + بنزیل الکل ، ب) دو مولکول 1- بوتانول ،ج) دو مولکول بنزیل الکل..... 67

شکل3-15- ساختار بهینه شده در سطح نظری B3LYP/6-31++g FOPT، الف) 1- پنتانول +بنزیل الکل ، ب)دو مولکول 1- پنتانول ،ج)دو مولکول بنزیل الکل.....69
شکل3-16 - انرژی برهمکنش سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها در روش‌ها و توابع مختلف محاسبه شده 71
شکل3-17-انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها محاسبه شده با روش HF و تابع پایه 6-31G..... 72
شکل3-18-انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها محاسبه شده با روش HF و تابع پایه 6-31+G.....72
شکل3-19 - انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها محاسبه شده با روش HF و تابع پایه 6-31++G.....72
شکل3-20- انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها محاسبه شده با روش B3LYP تابع پایه 6-31+G.....72
شکل3-21 - انرژی برهم‌کنش بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها محاسبه شده با روش B3LYP و تابع پایه 6-31++G 73
شکل3- 22- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده(BSSE) سیستم بنزیل الکل + آلکانول‌ها.....75
شکل 3-23- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده(BSSE) بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با روش HF و تابع پایه 6-31G 75
شکل 3-24- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده (BSSE) ب‌نزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با روش HF و تابع پایه 6-31+G 75
شکل3-25- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده (BSSE) بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با روش B3LYP و تابع پایه 6-31+G.....76
شکل 3-26- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده (BSSE) بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با روش HF و تابع پایه6-31++G.....76
شکل 3-27- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده (BSSE) بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با روش B3LYP و تابع پایه 6-31++G 76
شکل3-28- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها (c_1-c_5) با مدل NRTL در سطح نظری HF/6-31G..... 80
شکل3-29- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها (c_1-c_5) با مدل NRTL در سطح نظری HF/6-31+G.....80
شکل3-30- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها (c_1-c_5) با مدل NRTL در سطح نظری HF/6-31++G.....81

شکل3-31- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها
(c_1-c_5) با مدل NRTL در سطح نظری HF/6-31++G..... 81
شکل3-32- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها
(c_1-c_5) با مدل NRTL در سطح نظری B3LYP/6-31++G..... 82

جدول 3-1-انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید.....41
جدول 3-2- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش HF و مدلNRTL.....43
جدول 3-3- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش HF و مدلNRTL.....44
جدول 3-4- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش B3LYP و مدلNRTL.....46
جدول 3-5- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش MP2 و مدلNRTL 48
جدول 3-6- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش HF و مدلWilson 50
جدول 3-7- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش B3LYP و مدل Wilson 51
جدول 3-8- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم متان + هیدروژن سولفید با روش MP2 و همبسته شده با مدل Wilson 52
جدول3-9-انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش در معادلات NRTL، Wilson در سیستم استونیتریل + آب.....55
جدول 3-10-آنتالپی مولی فزونی سیستم استونیتریل + آب،محاسبه شده با دو روش NRTL و Wilson..... 56
جدول 3- 11- انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم متانول + بنزیل الکل.....61
جدول 3- 12- انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم اتانول + بنزیل الکل.....63
جدول 3- 13- انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پروپانول + بنزیل الکل.....65
جدول 3- 14- انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- بوتانول + بنزیل الکل.....68

عنوان	فهرست جدول‌ها	صفحه

جدول 3- 15- انرژی برهم‌کنش و پارامتر انرژی برهم‌کنش سیستم 1- پنتانول + بنزیل الکل.....70
جدول3-16- انرژی برهم‌کنش تصحیح شده بنزیل الکل + آلکانول‌ها 74
جدول3-17- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با مدل NRTL و روش HF با تابع پایه 6-31G و 6-31+G.....77
جدول3-18- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با مدل NRTL و روش HF با تابع پایه 6-31++G و روش B3LYP با تابع پایه 6-31G.....78
جدول3-19- آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده در سیستم بنزیل الکل + 1- آلکانول‌ها با مدل NRTL و روش B3LYP با تابع پایه 6-31++G.....79

شیمی محاسباتی

شیمی محاسباتی شاخه‌ای از شیمی نظری است که هدف اصلی آن ایجاد تقریب‌های ریاضی و برنامه‌های کامپیوتری کارآمد برای محاسبهٔ خواص مولکولها (از قبیل انرژی کل، گشتاور دوقطبی و چهارقطبی، فرکانس‌های ارتعاشی، میزان واکنش‌پذیری و دیگر خواص طیفی) و به‌کارگیری این برنامه‌ها برای دسترسی به اهداف شیمیایی است. این اصطلاح گاهی اوقات به حوزهٔ مشترک علم کامپیوتر و شیمی اطلاق می‌شود[1].

مقدمه‌ای بر روش‌های مکانیک کوانتومی

از شیمی محاسباتی به عنوان علمی که قدیمی و جوان است می‌توان یاد کرد. این علم قدیمی است از آن لحاظ که پایه‌های آن در اوایل قرن بیستم بنا نهاده شده است و جوان است از آن لحاظ که با اختراع کامپیوترهای با سرعت بالا در سال‌های اخیر می‌توان محاسبات را به سرعت و در کمترین زمان ممکن انجام داد. برای مولکول‌هایی که در آن‌ها چندین هسته و الکترون وجود دارند محاسبات مکانیک کوانتومی پیچیده است، بعلاوه توابع موج الکترونی وابسته به چندین پارامتر مانند فاصله‌های پیوندی و زوایای دو وجهی است. چهار روش عمده برای محاسبه خواص مولکولی عبارتند از: روش‌های از اساس[1] ، روش‌های تابعیت چگالی[2]، روش‌های نیمه تجربی و روش مکانیک مولکولی[2].

یک محاسبه از اساس، هامیلتونی واقعی را به‌کار می‌برد و به غیر از مقادیر ثابت فیزیکی از داده‌های تجربی دیگری استفاده نمی‌کند همچنین صحت محاسبات در آن‌ها به علت در نظرگرفتن تمام برهم‌کنش‌ها بالاست. روش محاسبه میدان خودسازگار هارتری فاک اولین روش محاسباتی از اساس است که در آن معادله شرودینگر غیر وابسته به زمان استفاده می‌شود. روش تابعیت چگالی تلاشی برای محاسبه تابع موج نمی‌کند و در عوض دانسیته احتمال الکترونی مولکولی، ρ را محاسبه کرده و خواص مولکولی را با استفاده از آن محاسبه می‌کند[1].

1 . Ab initio
2 Density functional theory

روش‌های مکانیک کوانتومی نیمه تجربی از هامیلتونی ساده‌تری نسبت به هامیلتونی مولکولی واقعی استفاده می‌کنند و پارامترهایی را به کار می‌گیرند که مقادیر آن‌ها برای هماهنگ کردن نتایج حاصل از محاسبه با نتایج تجربی تنظیم می‌شود. شیمی علمی است که با ساختار، تبدیلات و خواص مولکولی سروکار دارد. شیمی محاسباتی زیر شاخه‌ای از روش‌های ریاضی می‌باشد که با قوانین فیزیک برای مطالعه ساختار مولکولی و فرآیندهای شیمیایی ترکیب شده است[2].

با معلوم بودن مجموعه‌ای از هسته‌ها و الکترون‌ها، شیمی محاسباتی قادر است، خواص زیر را محاسبه کند:

الف) آرایش هندسی هسته‌ها که مطابق با پایدارترین آرایش ممکن برای مولکول است.

ب) انرژی نسبی آن‌ها

ج) خواص مولکولی (مانند گشتاور دوقطبی، قطبش‌پذیری و طیف NMR و ...)

شیمی محاسباتی در کنار گسترش روش‌های محاسباتی جدید، بیشتر به داده‌های به‌دست آمده راجع به مسائل شیمیایی متمرکز شده است. البته اثر متقابلی بین شیمی محاسباتی کلاسیک و شیمی کامپیوتری وجود دارد. گسترش روش‌های محاسباتی جدید ممکن است ما را قادر به مطالعه مسائل جدیدی سازد و نتایج حاصل از محاسبات ممکن است بسیاری از محدودیت‌ها را آشکار ساخته و بهبود در تئوری مورد استفاده را پیشنهاد کند. بسته به دقت خواسته شده و ماهیت سیستم‌های در دست بررسی، می‌توان اطلاعات مفیدی در مورد سیستم‌های شامل چندین هزار ذره به‌دست آورد[1].

مکانیک کوانتوم شامل محاسباتی می‌شود که رفتار الکترون‌ها را توصیف می‌کند. تا به حال معادلات مکانیک کوانتومی به طور دقیق برای سیستمی به جز هیدروژن و اتم‌های هیدروژن مانند حل نشده و محاسبات بر اساس یک سری تقریب‌ها بنا نهاده شده‌اند . برای استفاده از شیمی محاسباتی باید بدانیم این تقریب‌ها به چه صورت عمل کرده و چه نتایجی از این تقریب‌ها انتظار می‌رود.

سنتز یک ترکیب در آزمایشگاه به ماه‌ها وقت و مواد اولیه احتیاج دارد وممکن است منجر به تولید گازهای سمی شود. در صورتی که با استفاده از شیمی محاسباتی می‌توان اطلاعاتی از سیستم مولکولی بسیار آسان‌تر از روش‌های تجربی به‌دست آورد. به عنوان مثال می‌توان محاسبه طول پیوند، زوایای پیوند، ممان دوقطبی، طیف‌های NMR و حدواسط‌ها را ذکر نمود[1].

بسته های نرم افزاری

گوسین[3] یک برنامه نرم افزاری شیمی محاسباتی است که توسط جان پاپل طراحی شده است. نامگذاری این نرم‌افزار، از اوربیتال‌های گوسی پاپل گرفته شده است که این اوربیتال‌ها سرعت محاسبات را در مقایسه با اوربیتال‌های نوع اسلیتر بالا می‌برند[3].

3 .Gaussian