

## الكيمياء الحاسوبية Computational Chemistry

تمثل الكيمياء النظرية الوصف الرياضي للكيمياء، ويطلق مصطلح الكيمياء الحاسوبية عندما يتم تنفيذ الطريقة الرياضية المطورة بشكل جيد باستخدام الحاسوب. وبذلك يمكن حساب ودراسة التراكيب والاطياف الجزيئية ومن أهم تطبيقات الكيمياء الحاسوبية:

(1) حساب اطوال الأواصر والزوايا في الجزيئة والشحنات المتمركزة على الذرات المكونة لها.

(2) حساب عزم ثنائي القطب.

(3) حساب الطاقة الكامنة للدوران.

(4) حساب الترددات الاهتزازية.

(5) حساب الأطياف الإلكترونية. Uv-visible, IR

(6) حساب الإزاحات الكيميائية وثوابت الازدواج في اطياف ال NMR .

(7) دراسة التآصر الهيدروجيني البيني والضمني.

(8) دراسة الايزومرات الهندسية والتوتومرية.

وهناك طريقتان شائعتان للحساب هما:

1-حسابات الميكانيك الجزيئي... (Molecular Mechanics (MM, AMBER, BIO, OPLS .... وهذا يتضمن عدة طرق ( مستويات نظريه ) ..ولا تعتمد على ميكانيك الكم بل على الميكانيك التقليدي اي تعتمد على معادلات نيوتن ( معادلة لاكرانج , معادلة هاملتون ) .

تستعمل في حساب اطوال الاواصر وزوايا

2-حسابات تعتمد على معادلة شرودنكر ( تعتمد على ميكانيك الكم )

1- الشبه التجريبية Semi empirical

مثل CNDO, INDO, MINDO, AM1, PM3, ZINDO/1,ZINDO/S. TND0

وتمثل حسابات كمييه + عمليه

لكنها اقل دقة ... وقت اقصر في إجراء العمليات الحسابية ..تستخدم لإعداد كبيرة من الذرات تصل الى 500 ذرة

2-طريقة الحسابات الأولية ab-initio

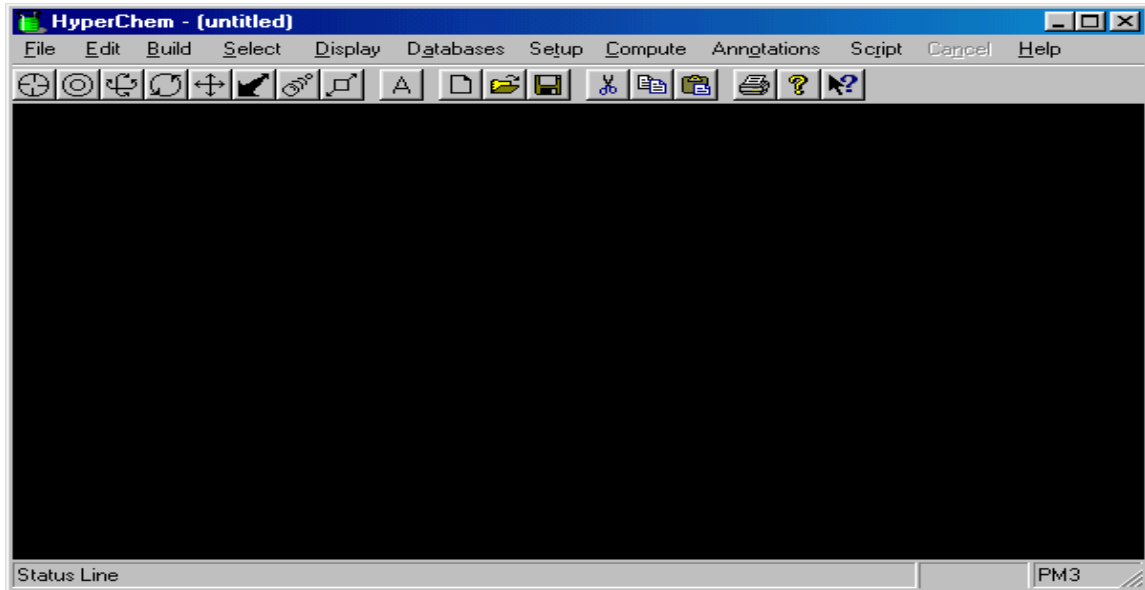
وهي تمثل حسابات كمييه خالصة وتكون ( اكثر دقة ...تتطلب وقت اكثر لاجراء الحسابات ...وتستخدم لجزيئات الصغيرة )

### برنامج الهايبركم hyperchem

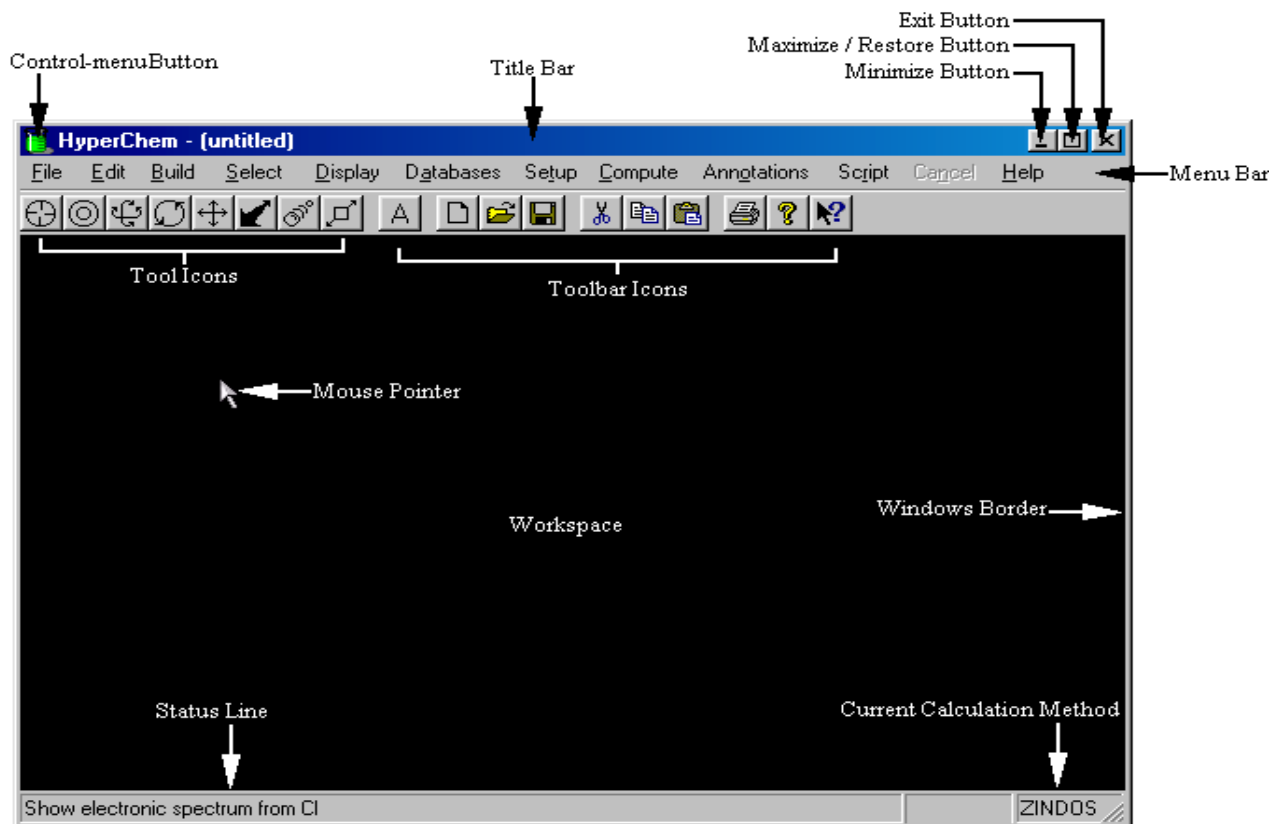
ايكونة البرنامج بعد تنصيب البرنامج ....



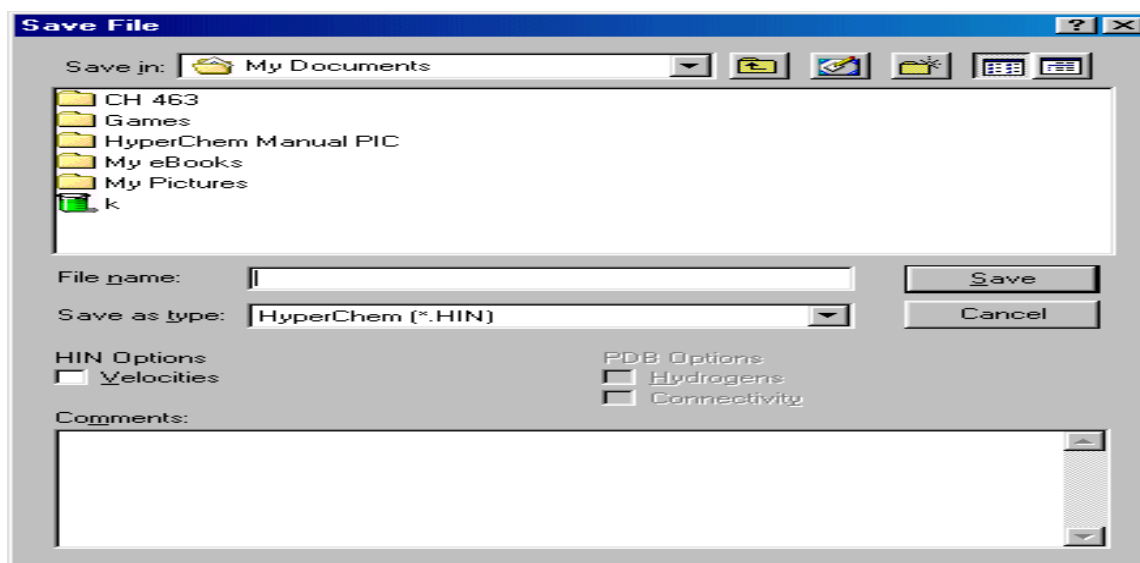
## واجهة البرنامج ( نافذة البرنامج )



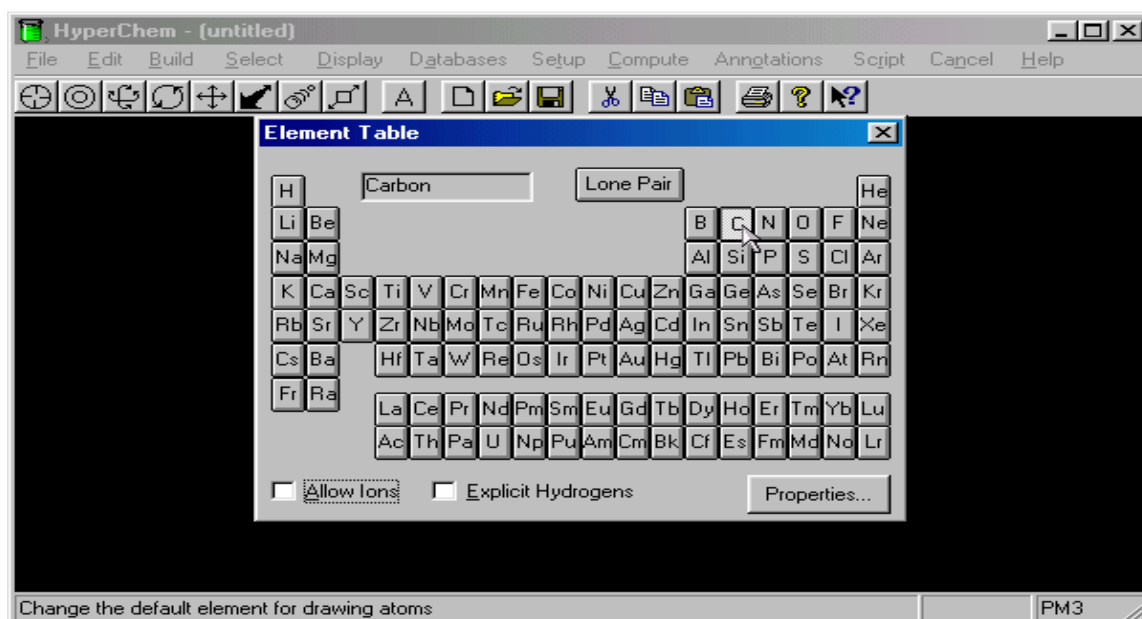
## شكل يوضح تعريف واجهة البرنامج



شكل يوضح...خزن الفايل الخاص بالحسابات



شكل يوضح الجدول الدوري الذي يستخدم لرسم المركبات



شكل يوضح عملية رسم المركب

