الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلميجامعة الشهيد حمة لخضر الوادي كلية الـــتكنـولـوجيـا

مذكرة مقدمة لنيل شهادة:

مـــاســـتر أكـــاديـمـــي

ميدان :علوم وتكنولوجيا

شعبة : هندسة الطرائق التخصص:

هندسة كيميائية

من تقديم الطالبات :

محده صفاء

دبار زهيرة

لمنور نادية

بعنوان

محاكاة الميكانيكا الكمومية للهياكل المعدنية العضوية(MOFs)

تمت مناقشة المذكرة في2024/06/14

أمام اللجنة المكونة من الأساتذة:

د.سمية زغود	رئيسا	جامعة الوادي.
د. إلهام بن عمر	مناقشا	جامعة الوادي.
د .عمار بن مية	مؤطرا	جامعة الوادي.

2024/2023

إهداء

باسم الله وعلى بركت الله وصلاة والسلام على رسول الله.

أرفع قبعتي احتراماً لسنين مضت من الدراسة وقد ابتدأ الوداع مع كل ابتسامه مع كل لقطة أخذت بدء الوداع، وفي البداية الشكر لله.

واهدي تخرجي وثمرت تعبي إلى من اعشقها الى نبض قلبي الى من تستقبلني بابتسامه وتودعني بدعوة "امي الغالية" اسال الله ان يحفظها لي، والى سندي وحزام ظهري وأماني "أبي الغالي" .

إلى وطني وملاذ حياتي، وإلى من ساندوني ووقفوا معي الى من احببتهم صديقاتي اخواني واخواتي.

- صفاء محده

إهداء

بعد سنوات من الجد والاجتهاد والسهر والتعب اصل الى نهاية رحلتي الاكاديمية، لا يسعني إلا أن أشكر الله تعالى على توفيقه وعونه.

إلى صاحب السيرة العطرة، والفكر المستنير فلقد كان له الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي والدي الحبيب أطال الله في عمره.

إلى من وضعتني على طريق الحياة وجعلتني رابط الجأش وراعتني حتى صرت كبيرا أمي الغالية طيب الله ثراها.

إلى إخوتي الذين كانوا دائماً سندي ومصدر قوتي لهم بالغ الأثر في كثير من العقبات والصعاب، إلى أصدقائي الأعزاء الذين جعلوا سنوات الدراسة مليئة باللحظات السعيدة والتجارب القيمة وإلى كل من ساندني في مسيرتي التعليمية، شكراً لكم من القلب. أهديكم هذا العمل تعبيراً عن امتناني وشكري العميق.

- *دبار زهيره*

إهداء

إلى من كان له الفضل الأول في حياتي، إلى من علمني وأرشدني، إلى من قدم لي الدعم والمساندة دون مقابل، إلى والدي العزيزين.

إلى أستاذي المشرف الذي لم يبخل علي بالنصح والإرشاد، إلى من كان له دور كبير في توجيهي خلال إعداد هذه المذكرة، أشكرك جزيل الشكر.

إلى أصدقائي وزملائي الذين شاركوني أفراح الدراسة وأحزانها، إلى من وقفوا بجانبي في كل الأوقات، شكراً لكم من القلب.

إلى كل من ساعدني ولو بكلمة تشجيع، أهدي لكم هذه المذكرة عرفاناً وتقديراً.

نادية لمنور

الشكر

نعطي خالص الشكر لمشرف هذه المذكرة "بن ميه عمار" الذي كان لنا سند في إرشادنا لنحيط لكم هاته المذكرة بقدر ما أمكن من معلومات قيمة.

نحن رفيقات في هذه المذكر تعاهدنا على العمل بإخلاص ومع احترام كل فكرة تطرح بيننا وكنا والحمد لله على ذلك.

أستاذاتنا المحترمات مناقشة المذكرة بن عمر إلهام و رئيسة اللجنة زغود سمية كل خالص الشكر لهم على تعاملهم واخلاقهم وتعليماتهم التي كانت لا شك جزء مهم لوصول الى مذكرة ذات معلومات سديدة.

الفهرس

الرقم	العنوان	الصفحة
	مقدمة العامة	1
	الفصل الأول: ميكانيكا الكم في علوم المواد	
1	مقدمة	4
2	تاريخ ميكانيكا الكم	4
3	تفاعلات اللكم	5
4	الانهيار الموجي	5
5	التشبيه بين الكلاسيكية والكمومية	5
6	التفاعلات الكمومية في المواد	6
7	نضرية الكثافة الاكترونية	6
8	تاثير الكم على الخواص الحرارية والكهربائية	7
9	النضام الكمومي	8
10	محاكات الترتيب اللذري	9
11	خاتمة	10
	مراجع الفصل الأول	
	الفصل الثاني: تقنيات الحساب باستخدام Gaussian دراسة المواد	
1	المقدمة	13
2	استخدام برنامج G09W ومحتوياته	13
1.2	نافذة معالجة المهام (النافذة الرئيسية)	13
1.1.2	قائمة الملف	13
2.1.2	قائمة العملية	14
3.1.2	قائمة العرض	14
4.1.2	الرموز	15
2.2	نافذة تحرير الوظيفة	16
1.2.2	قائمة الملفات	17
2.2.2	خيار التحقق من المسار	17
3.2.2	خيار تعيين البداية	17
4.2.2	الأيقونات	18
5.2.2	زر الخطوات الإضافية	19
3.2	نافذة خطوات المهمة الإضافية	19
1.3.2	مظهر النافذة الأولي	19
2.3.2	قائمة الخطوات	20
3.3.2	قائمة العرض	20
4.3.2	أيقونات	21
4.2	نافذة تحرير قائمة الدُفعات	21

1.4.2	تحرير ملف التحكم بالدفعات	21
2.4.2	قائمة الملفات	22
5.2	نافذة إعادة ترتيب البيانات	22
1.5.2	نقل عنصر واحد	23
2.5.2	نقل عدة عناصر باستخدام زر "التجميع"	23
3.5.2	أزرار الخروج	23
6.2	نافذة التفضيلات Gaussian 09	24
1.6.2	نافذة تفضيلات العرض	25
2.6.2	نافذة تفضيلات التحرير	27
3.6.2	نافذة تفضيلات العملية	28
7.2	أدوات Gaussian 09W	29
3	تحضير ملفات الإدخال	30
1.3	نظرة عامة على إدخال برنامج Gaussian 09	30
2.3	أنواع الوظائف Gaussian 09	33
3.3	الكيمياء النموذجية	34
4.3	مجموعات الأساس	35
5.3	نظرة عامة على مواصفات الجزيء	36
4	الكلمات الرئيسية في Gaussian 09	37
5	برامج الأدوات	37
6	متغير البيئة GAUSS_MEMDEF	38
7	تشغيل Gaussian	38
8	قيود البرنامج	39
9	الخاتمة	39
	مراجع الفصل الثاني	
	الفصل الثالث : الدراسة الحاسوبية لتخليق إطارات معدنية عضوية (MOF) من Zn-EDTA واقتراح الأمثلية	
1	المقدمة	43
2	الطرق الحاسوبية	43
3	حسابات الطاقة	44
4	طريقةsemi-empirical PM6	45
5	حساب طاقة التفاعل	45
6	نتائج الكيمياء الحرارية	47
7	نتائج المطيافية تحت الحمراء	49
8	الخاتمة	50
	مراجع الفصل الثالث	
	الخاتمة العامة	52

الشكل	العنوان	الصفحة
1.I	رسمة توضيحية للتفاعلات الكمومية	6
2.I	رسمة تخطيطية لبنية الذرة	7
1.II	نافذة معالجة المهام (النافذة الرئيسية)	13
2.II	نافذة تحرير الوظيفة	16
3.II	خيار تعيين البداية	18
4.II	نافذة خطوات المهمة الإضافية	19
5.II	مظهر النافذة الأولي	20
6.II	نافذة تحرير قائمة الدفعات	22
7.II	توضح كيفية نقل عنصر واحد	23
8.II	نافذة التفضيلات Gaussian 09W	24
9.II	مظهر Motif	25
10.II	نافذة تفضيلات التحرير	27
11.II	نافذة تفضيلات العملية	28
1.III	مخطط تفصيلي للتخليق الاصطناعي للبوليمرات المتضافرة ذات المعدن (MOF n(C10H12N2O8Zn2	44
2.III	يبين الشكل ثلاثي الأبعاد لجزيئة MOF	46
3.III	طيف الأشعة تحت الحمراء لجزيئة Zn-MOF	49

الجدول	العنوان	الصفحة
1.1	تاريخ ميكانيكا الكم	4
1.II	الأقسام المحتملة التي قد تظهر ضمن ملف إدخال Gaussian 09	33
2.II	يوضح الطرق المتاحة في Gaussian	34
3.II	وظائف استقطاب التكافؤ الموجودة لمختلف الذرات المدرجة في مجموعات الأساس	36
1.III	يبين أهم القيم الترموديناميكية للنظام	48

ملخص: تتناول هذه المذكرة دراسة موسعة حول الهياكل المعدنية العضوية (MOFs) وتطبيقاتها المتنوعة في مجالات الطاقة، البيئة، الطب، والإلكترونيات. تهدف الدراسة إلى استخدام ميكانيكا الكم لفهم الخصائص الأساسية لهذه الهياكل، وتقديم نموذج محاكاة دقيق باستخدام برنامج Gaussian 09W. يتم تسليط الضوء على أهمية ميكانيكا الكم في تفسير وتخليق مواد جديدة بخصائص فريدة، بالإضافة إلى دور التقنيات الحسابية في تحليل ومعالجة البيانات الكيميائية. تركز الدراسة بشكل خاص على نموذج Zn-EDTA لفهم إمكانيات تحسين وتطوير الهياكل المعدنية العضوية. تتضمن الدراسة شرحًا مفصلًا للنوافذ المختلفة لواجهة المستخدم الخاصة ببرنامج Gaussian ، مما يوفر دليلاً شاملاً للمستخدمين لفهم كيفية التحكم في المهام وتفسير النتائج. تسعى هذه الدراسة إلى تعزيز الفهم النظري والتطبيقي للمواد المعدنية العضوية، مما يساهم في التقدم العلمي والتكنولوجي لهذا المجال الحيوي.

الكلمات المفتاحية : الهياكل المعدنية العضوية، ميكانيكا الكم، Gaussian 09W، Zn-EDTA، الكيمياء الحسابية

Résumé : Cette mémoire traite d'une étude approfondie sur les structures métalliques-organique (MOFs) et leurs applications variées dans les domaines de l'énergie, de l'environnement, de la médecine et de l'électronique. L'étude vise à utiliser la mécanique quantique pour comprendre les propriétés fondamentales de ces structures et à fournir un modèle de simulation précis utilisant le logiciel Gaussian 09W. L'accent est mis sur l'importance de la mécanique quantique pour l'interprétation et la création de nouveaux matériaux avec des propriétés uniques, ainsi que sur le rôle des techniques computationnelles dans l'analyse et le traitement des données chimiques. L'étude se concentre particulièrement sur le modèle Zn-EDTA pour comprendre les possibilités d'amélioration et de développement des structures métalliques-organique. Elle comprend une explication détaillée des différentes fenêtres de l'interface utilisateur de Gaussian, offrant ainsi un guide complet aux utilisateurs pour comprendre comment gérer les tâches et interpréter les résultats. Cette étude vise à renforcer la compréhension théorique et pratique des matériaux métalliques-organique, contribuant ainsi au progrès scientifique et technologique de ce domaine crucial.

Mots-clés : Structures métalliques-organique, mécanique quantique, Gaussian 09W, Zn-EDTA, chimie computationnelle

Abstract: This thesis presents an extensive study on Metal-Organic Frameworks (MOFs) and their diverse applications in energy, environment, medicine, and electronics. The study aims to use quantum mechanics to understand the fundamental properties of these frameworks and to provide an accurate simulation model using the Gaussian 09W software. The importance of quantum mechanics in interpreting and synthesizing new materials with unique properties is highlighted, along with the role of computational techniques in analyzing and processing chemical data. The study focuses particularly on the Zn-EDTA model to understand the potential for improving and developing metal-organic frameworks. It includes a detailed explanation of the various windows of the Gaussian user interface, providing a comprehensive guide for users to understand how to manage tasks and interpret results. This study seeks to enhance the theoretical and practical understanding of metal-organic materials, contributing to the scientific and technological advancement of this vital field.

Keywords: Metal-Organic Frameworks, Quantum Mechanics, Gaussian 09W, Zn-EDTA, Computational Chemistry

المقدمة العامة

المقدمة العامة

في عالم اليوم حيث تتزايد الحاجة إلى مواد جديدة تتميز بخصائص فريدة من نوعها لتطبيقات متنوعة في الطاقة البيئة و الطب والإلكترونيات، ظهرت الهياكل المعدنية العضوية (Metal-Organic Frameworks, MOFs) كفئة هامة من المواد الوظيفية بفضل تنوعها الهيكلي ووظائفها الكيميائية، إن القدرة على تصميم وتخليق هذه الهياكل بدقة يفتح آفاقاً جديدة لاستحداث مواد ذات خصائص محددة سلفاً، ضمن هذا الإطار تعد ميكانيكا الكم أداة قوية لفهم الجوانب الأساسية لتفاعلات وخصائص المواد على المستوى الذري والجزيئي[1].

بحيث سنبحث في كيفية توظيف مبادئ ميكانيكا الكم لتقديم نظرة متعمقة على طبيعة وخصائص هياكل MOFs. سنتناول دور ميكانيكا الكم في علوم المواد وكيف أنها تعد بمثابة الأساس الذي تنبني عليه التقنيات الحسابية الحديثة كتلك المستخدمة في برنامج Gaussian، لتوفير دراسات مفصلة ودقيقة لمواد MOFs [1].

سيشمل الفصل الأول تقديماً للمفاهيم الأساسية لميكانيكا الكم وأهميتها في فهم ووصف خواص المواد على المستوى النانوي ، بحيث نبدأ مشوارنا بتأسيس معرفي يسبر أغوار الميكانيكا الكمية وعلاقتها الوثيقة بعلوم المواد، موضحين كيف أن هذا الفرع الفيزيائي أحدث ثورة في فهمنا للهياكل على المستوى الذري والجزيئي، وكيف تمكنا من تطبيق هذه المعرفة في تخليق مواد جديدة وفريدة من نوعها، فالمعادلات الكمومية ليست مجرد صيغ رياضية، بل هي خارطة الطريق التي تكشف لنا كيف يمكن للمادة أن تتصرف في نطاق يصعب تصوره. ومن هذه الإدراكات الأولية، نتعمق أكثر في كيفية استخدام هذه المعلومات لكشف وتفسير الخصائص الفريدة للمواد.

تعتبر الكيمياء الكمومية مجالًا أساسيًا في العلوم الكيميائية، حيث تعتمد على مبادئ الفيزياء الكمومية لفهم وتفسير الظواهر الكيميائية على المستوى الذري والجزيئي. يركز الفصل الثاني على استخدام برنامجGaussian 09W ، الذي يعد أداة قوية لتحليل ومحاكاة الظواهر الكيميائية المعقدة. يتم تنظيم محتوى الفصل حول النوافذ المختلفة لواجهة المستخدم الخاصة بالبرنامج، مما يوفر دليلًا شاملًا للمستخدمين لفهم كيفية التحكم في المهام، ومعالجة البيانات، وتفسير النتائج.

يعد Gaussian 09W أداة متعددة الوظائف، حيث يمكن استخدامها لإنشاء ملفات الإدخال، ومعالجة المهام المختلفة، وتحرير ملفات التحكم، والتحقق من المسارات، بالإضافة إلى تعديل التفضيلات المتعلقة بالعرض والتحرير والمعالجة. تتيح هذه الأدوات للمستخدمين إمكانية تحليل التفاعلات الكيميائية، وحساب الخصائص الجزيئية، وتنفيذ عمليات المحاكاة بدقة وكفاءة عالية[2].

أما الفصل الثالث فيقدم دراسة مستفيضة حول الطرق الحاسوبية العصرية لتخليق الهياكل المعدنية العضوية، وكيف يمكن تحسين وتطوير هذه العمليات للحصول على هياكل أكثر فاعلية من حيث الأداء والاستقرار مستنيرين بالنتائج التي توصلنا إليها من خلال استخدام Zn_EDTA كنموذج دراسة، إن الغوص في عالم التصميم والتحسين على المستوى الجزيئي يعد تحديًا كبيرًا وفرصة فريدة لإثبات الإمكانيات التي يحملها هذا الفرع من العلم، بما يقدمه من معلومات قيّمة عن الطرائق المثالية لتخليق هذه الهياكل وتعزيز خصائصها[3].

ستعمل هذه المذكرة على سد الفجوة بين النظرية والتطبيق في مجال MOFs، وستقدم رؤى جديدة تساعد في التقدم العلمي والتكنولوجي للمواد المعدنية العضوية، ومن خلال نهج متعدد التخصصات يجمع بين الكيمياء، الفيزياء وعلوم الكمبيوتر، نتوقع أن تسهم هذه الدراسة في إرساء أسس لفهم أفضل لطرائق تصميم وتخليق هذه الهياكل المعدنية العضوية[3].

[1] S. M. Rogge *et al.*, "Metal–organic and covalent organic frameworks as single-site catalysts," vol. 46, no. 11, pp. 3134-3184, 2017.

[2] A. J. W. Frisch, USA, 25p, "gaussian 09W Reference," vol. 470, 2009.

[3] J. B. DeCoste and G. W. J. C. r. Peterson، " Metal–organic frameworks for air purification of toxic chemicals," vol. 114, no. 11, pp. 5695-5727, 2014.

الفصل الأول

ميكانيكا الكم في علوم المواد

1. المقدمة :

الكيمياء الكمومية هي فرع من الكيمياء يستند إلى مبادئ الفيزياء الكمومية لفهم وتفسير الظواهر الكيميائية. تقوم الكيمياء الكمومية بدراسة السلوك الذري والجزيئي على المستوى الكمومي، حيث يتم استخدام المفاهيم والمبادئ الكمومية للوصول إلى فهم أعمق للتفاعلات الكيميائية والخصائص الكيميائية للمواد و من مبادئ الكيمياء الكمومية تستند إلى الأفكار والمفاهيم التي تم تطويرها في مبدا الفيزياء الكمومية، مستوى الذرات والجزيئات، يعتمد الكيميائيون الكميون التجريبيون بشكل كبير على المطياف (التحليل الطيفي) الذي يمكن من خلاله الحصول على المعلومات المتعلقة بتكميم الطاقة على المقياس الجزيئي، الأساليب الشائعة هي التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء (IR)، والرنين المغناطيسي النووي الطيف (NMR)، والفحص المجهري بالمسبار الماسح ، تسعى كيمياء الكم النظرية (والتي تصنَّف اعمالها ايضًا تحت فئة الكيمياء الحاسوبية) إلى إيجاد تنبؤات النظرية الكمية حيث أن الذرات والجزيئات تملك طاقات منفصلة، ونظرًا لأن هذه المهمة تسبب عند تطبيقها على الأنواع متعددة الذرات معضلة الاجسام المتعددة لذلك يتم إجراء هذه الحسابات باستخدام أجهزة الحاسوب ، ينطوي ذلك على تفاعل عميق بين الأساليب التجريبية النظرية، ويقوم الكيميائيون الكميون بهذه الطريقة بالتحقيق في الظواهر الكيميائية ، تدرس كيمياء الكم أيضا الحالات المثارة، والحالات الانتقالية التي تحدث أثناء التفاعلات الكيميائية تطورت هذه المجالات معًا لتوفير نموذج دقيق للفهم الكمومي للتركيب الذري والتفاعلات الكيميائية[1] .

2. تاريخ ميكانيكا الكم:

في عصر التقدم السريع في مجال الفيزياء في النصف الثاني من القرن العشرين، ظهرت النظريات الكمومية التي غيرت تمامًا نظرتنا إلى العالم الذري والمولي. بدأ الفيزيائيون في تطوير نظريات كمومية للوصول إلى فهم أفضل للسلوك الذري والجزيئي و ذللك حسب التسلسل الحقبة الزمنية التالي[2, 3]:

الجدول **I**.1: تاريخ ميكانيكا الكم

التاريخ	الحدث
1920	ساهم لوي دي برويجلي في تطوير ميكانيكا المصفوفات، وقدم نظرية الميكانيكا الموجية.
	أسس نيلز بور ميكانيكا الكم باقتراح نظرية موجية للجسيمات، وقام بتطوير

	نظرية ماتريكس في الميكانيكا الكمية
1927	قام ويرنر هايزنبرغ بتطوير نظرية المصفوفات المصغرة لوصف حالات الطاقة في الذرة.
	أجرى كل من كومار ودي برويجلي أول تجربة لإثبات مفهوم الميكانيكا المصفوفية بواسطة تفاعلات نيترونات مع الليثيوم.
1980	ستمر تطور ميكانيكا الكم بفضل التطورات في الحوسبة الكمومية، والتجارب الكمومية المتقدمة، والتفاعل المتزايد مع الفيزياء الكلاسيكية

3. تفاعلات الكم:

تفاعلات الكم هي التفاعلات الفيزيائية التي تحدث على مستوى الطاقة الكمومية بين الجسيمات الصغيرة مثل الإلكترونات والفوتونات. يتم وصف هذه التفاعلات بواسطة ميكانيكا الكم، والتي تعتبر إطارًا نظريًا يشرح سلوك الأنظمة الفيزيائية على المستوى الدقيق جدًا. يمتاز عالم الكم ببعض الخصائص الفريدة مثل التداخل الكمومي وظاهرة انهيار الدالة الموجية، التي تختلف تمامًا عن التفاعلات التقليدية الموجودة في العالم الكلاسيكي[4].

4. الانهيار الموجي :

مفهوم الانهيار الموجي يعتبر جزءًا أساسيًا في ميكانيكا الكم، وهو يشير إلى التغيير المفاجئ في حالة النظام الكمومي عند إجراء عملية قياس. عندما نقوم بقياس خاصية معينة لجسيم كمومي، تتغير حالته بطريقة تسمى "انهيار الموجة" أو "الانهيار الكمومي". هذا الفهم يعكس كيف يؤثر القياس الكمومي على حالة النظام الكمومي[5].

5. التشبيه بين الكلاسيكية والكمومية:

.في الفيزياء الكلاسيكية، يمكننا استخدام المعادلات التفاضلية لوصف حركة الأجسام. أما في الكموم، يتم تمثيل الأجسام بواسطة الدوال الموجية.

.في الكلاسيكية، يمكن قياس حالة النظام دون تأثيرها. في الكموم، قياس حالة النظام يؤدي إلى انهيار الموجة.

.في الكموم، يمكن للدوال الموجية للجسيمات التداخل والانفصال معًا، مما يؤدي إلى ظواهر غريبة مثل تداخل الكم. في الكلاسيكية، يعتبر التداخل ظاهرة غير مألوفة.

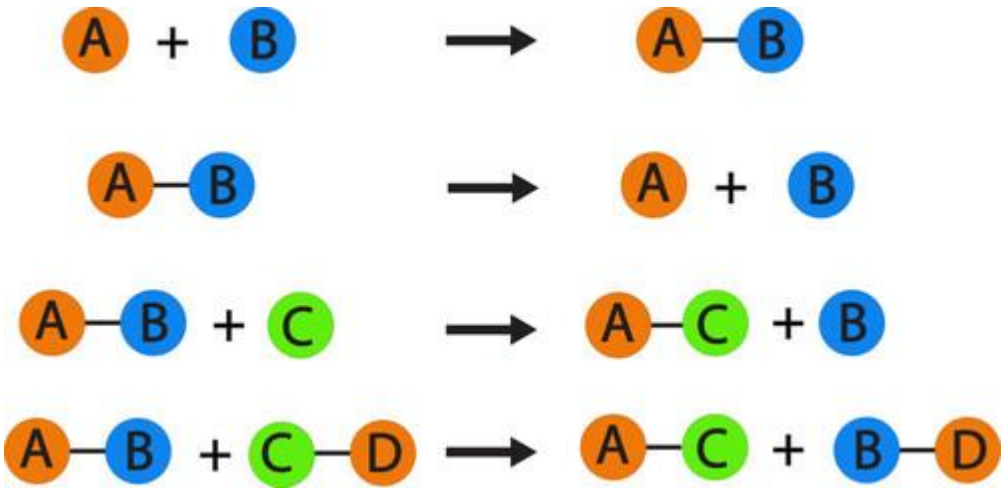
.في الكم، تتمثل الحالة في دالة موجية تحتوي على مجموعة من الاحتمالات. في الكلاسيكية، الحالة تكون محددة بشكل قاطع.

.في الكم، يمكن لتفاعلات الجسيمات أن تؤدي إلى تداخل وتأثيرات كمومية. في الكلاسيكية، يُفترض أن التفاعلات تتبع قوانين ميكانيكا الكلاسيك.

.في الكم، يمكن للجسيم أن يكون في حالة متعددة في نفس الوقت، مثل الانقسام الكمومي. في الكلاسيكية، الحالة الأساسية هي حالة واحدة فقط[6].

6. التفاعلات الكمومية في المواد:

تفاعلات الكم في المواد تشمل التفاعلات بين الجسيمات على المستوى الدقيق وفقًا لقوانين ميكانيكا الكم. يتم تمثيل حالة النظام الكمومي بواسطة الدوال الموجية، وتتداخل هذه الدوال لتكوّن نماذج معقدة للسلوك الكمومي للمواد. تشمل هذه التفاعلات تأثير الإلكترونات والنوى، وتشكيل الرابطات الكيميائية، وتحديد البنية الإلكترونية للمواد. يتم التأثير على خواص المواد مثل التوصيل الكهربائي والمغناطيسي والحراري على مستوى الكم، وتلعب دورًا حاسمًا في فهم سلوك المواد وتطوير تكنولوجيا المواد والتصميم وعليه نقدم التوضيح التالي[7] :



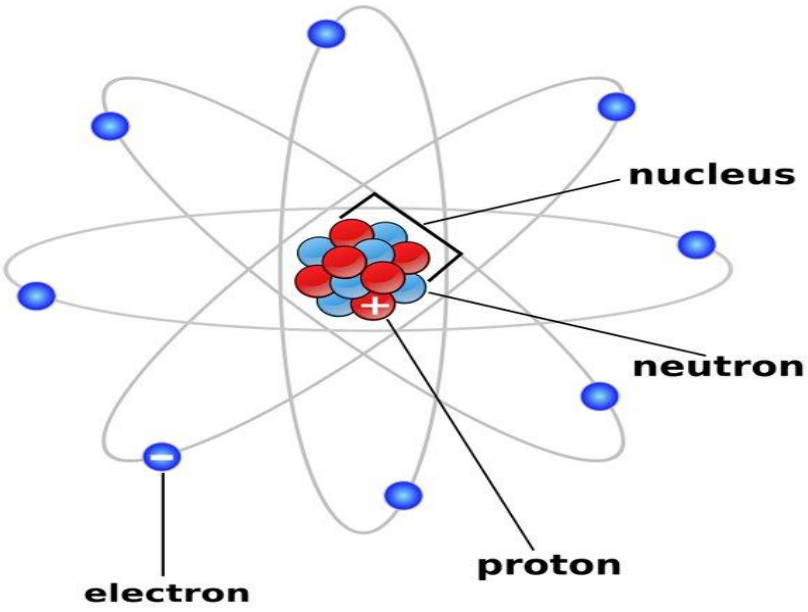
الشكل I.1: رسمة توضيحية للتفاعلات الكمومية

7. نظرية الكثافة الإلكترونية :

نظرية الكثافة الإلكترونية هي نظرية في مجال الفيزياء الكمومية تُستخدم لوصف توزيع الإلكترونات حول النوى الذرية في المواد. تعتمد هذه النظرية على استخدام الدوال الموجية لتمثيل حالات الإلكترونات وتوزيعها في الفضاء الذي يحيط بالنواة. تُحدد كثافة الإلكترونات بشكل ثلاثي الأبعاد، وتشير إلى احتمال وجود الإلكترونات في مواقع محددة حول النوى[8].

هذه النظرية تقوم بوصف كمي لتوزيع الكتلة الإلكترونية وترتيبها في الفضاء، وتتيح فهم سلوك الإلكترونات في المواد. يتم حساب الكثافة الإلكترونية الإجمالية كمتوسط لكثافة الإلكترونات في الفضاء، وتعكس كمية الإلكترونات في وحدة حجم معينة.

هذه النظرية لها أهمية كبيرة في الكيمياء الكمومية وعلوم المواد، حيث تسهم في فهم الترتيب الإلكتروني للذرات والجزيئات وتأثيراتها على الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد. تطور التكنولوجيا الحديثة، وخاصة تقنيات الحوسبة الكمومية، قد زاد من أهمية دراسة وتفسير توزيع الكثافة الإلكترونية للتقدم في فهم سلوك المواد على المستوى الكمومي[9].



الشكل I.2: رسمة تخطيطية لبنية الذرة

8. تأثير الكم على الخواص الحرارية والكهربائية:

تأثير الكم على الخواص الحرارية والكهربائية يتمثل في كيفية تفاعل الجسيمات على مستوى الكم مع هذه الخواص. هناك عدة جوانب يمكن التعرف عليها حيال تأثير الكم على هذه الخواص[10]:

1.التوزيع الطاقوية:

في مستوى الكم، يمكن للجسيمات مثل الإلكترونات أن تكون في حالات متعددة في نفس الوقت (حالة الانقسام الكمومي). هذا يؤثر على توزيع الطاقة والحرارة داخل المادة.

2.التوصيل الحراري:

تؤثر حركة الإلكترونات والفوتونات على التوصيل الحراري في المواد. في النظرية الكمومية، يمكن للإلكترونات أن تنتقل بين مستويات الطاقة بشكل كمومي، مما يؤدي إلى توصيل حراري فريد.

3.التوصيل الكهربائي:

على مستوى الكم، يمكن للإلكترونات أن تظهر تأثيرات كمومية مثل التداخل والانتقال الكمومي. هذا يؤثر على التوصيل الكهربائي، حيث يمكن للإلكترونات التحرك بحرية أو التفاعل بشكل فريد.

4.الظواهر الكمومية في الحرارة:

تظهر ظواهر كمومية مثل تأثير القياس الكمومي عند قياس درجة الحرارة لنظام صغير. هذا يتسبب في انهيار الموجة الحرارية بشكل كمومي.

5.تأثير الكم على خصائص الأمواج الحرارية:

تظهر مفاهيم ميكانيكا الكم في تفسير سلوك الأمواج الحرارية والطاقة الحرارية على مستوى الكم، مما يساهم في فهم الظواهر الحرارية بشكل دقيق.

فهم هذه التأثيرات يساعد في تطوير المواد بشكل فعال وفهم الظواهر الحرارية والكهربائية على مستوى الكم، مما يؤدي إلى تقنيات أكثر دقة وكفاءة في مجالات مثل تصميم المواد وتكنولوجيا الطاقة .

9. التضاف الكمومي:

تعتبر التضاف الكمومية من أهم وأكثر الميزات الفريدة في مجال الفيزياء الكمومية، حيث تكشف عن سلوك الجسيمات الدقيقة على مستوى الكم. إحدى أبرز المميزات هي "تداخل الموجات"، وهو

ظاهرة تظهر عندما يتفاعل الجسيمات الكمومية ويتداخل مسارها. يعكس هذا التداخل تأثيراً كمومياً فريداً يؤدي إلى ظواهر مدهشة، مثل تكوين أنماط تداخل على الشاشة في تجربة الفجوة الثنائية.

ميزة أخرى مهمة تعتبر "انتقال الكم"، حيث يمكن للجسيمات الكمومية أن تنتقل بشكل فوري من حالة إلى حالة أخرى دون وجود حالة وسيطة. يظهر هذا التأثير في ظاهرة الانتقال الكمومي وهو جزء أساسي في فهم الطبيعة الكمومية للجسيمات.

تأثير آخر يتمثل في "الانهيار الموجي"، الذي يحدث عند قياس حالة الجسيم الكمومي. في هذا السياق، ينهار النظام الكمومي إلى حالة معينة على الفور، مما يعكس تأثيراً كمومياً فورياً عند القياس.

تشبيه الكمومية هو ميزة أخرى تميز العالم الكمومي، حيث يمكن للجسيمات الكمومية أن تشبه بعضها البعض حتى على مستوى الكم. هذا يشكل تحدّيًا كبيرًا للتفسيرات التقليدية ويبرز الطبيعة الفريدة للجسيمات الكمومية.

في الختام، تتجلى مميزات التضاف الكمومية في هذه الظواهر الفريدة والتي تشكل أساساً لفهمنا للعالم على مستوى الكم، وتفتح أبوابًا لاستكشافات مستقبلية وتطبيقات متقدمة في ميادين مثل الحوسبة الكمومية وتكنولوجيا المواد[11].

10. محاكاة الترتيب الذري:

محاكاة الترتيب الذري هي عملية نمذجة ومحاكاة السلوك والتفاعلات على مستوى الذرات والجزيئات. تعتمد هذه المحاكاة على مبادئ الفيزياء الكمومية والكيمياء، حيث يتم تمثيل الجسيمات الدقيقة بمفاهيم ميكانيكا الكم والتفاعلات الكيميائية بطريقة تكمل الطرائق التقليدية.

تبدأ المحاكاة بتمثيل المواد على مستوى الذرات، حيث يُنمِذج كل ذرة باستخدام البارامترات الكمومية مثل الكتلة والشحنة والطاقة. يتمثل الترتيب الذري في تحديد مواقع وحركات الذرات في النظام، مما يؤثر على الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد.

تستخدم محاكاة الترتيب الذري أيضًا مفاهيم ميكانيكا الكم لتمثيل حالات الإلكترونات وتفاعلاتها مع النوى الذرية. يُمثل الطيف الإلكتروني وتشكيل الرابطات الكيميائية جزءًا من هذه المحاكاة، حيث يُتيح للباحثين فهم كيفية تأثير هذه العوامل على السلوك الكيميائي للمواد.

إلى جانب ذلك، تقدم محاكاة الترتيب الذري إمكانيات لدراسة تأثير التغيرات في الظروف البيئية أو التفاعلات الكيميائية على مستوى الذرات. يمكن أن تُساهم هذه المحاكاة في تصميم وتحسين المواد على المستوى الذري، وفهم الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد بشكل أفضل.

في النهاية، تُعتبر محاكاة الترتيب الذري أداة قوية تمكننا من استكشاف عوالم الطبيعة على مستوى الجزيئات والذرات، وتقديم رؤى قيمة للفهم العميق للظواهر الكيميائية والفيزيائية[12].

11. خاتمة :

في ختام إستكشافنا لميكانيكا الكم وتطبيقها في مجال محاكاة المواد، نجد أن هذا الفرع المهم من الفيزياء يمثل أساساً حيوياً لتفهمنا للعالم على المستوى الذري والجزيئي. تعتمد ميكانيكا الكم على مفاهيم فريدة مثل التفاوت الكمومي والتداخل الكمومي، مما يفتح أمامنا نوافذ جديدة لاستكشاف الظواهر الطبيعية.

تطبيق ميكانيكا الكم في محاكاة المواد يسهم بشكل كبير في تفسير وتوقع الخصائص والسلوكيات على مستوى الذرات والجزيئات. من خلال تقنيات الحساب الكمومي، يمكننا دراسة التفاعلات الكيميائية، والخصائص الإلكترونية للمواد، وتصميم مواد جديدة بطريقة دقيقة.

مع التقدم المستمر في تكنولوجيا المحاكاة الكمومية وقوة الحوسبة الكمومية، نتوقع أن يزيد تأثير ميكانيكا الكم في فهمنا وتصميمنا للمواد. هذا يفتح الباب أمام تطبيقات متعددة في مجالات العلوم والتكنولوجيا، بدءًا من الصناعة الكيميائية إلى تطوير الأدوية وتكنولوجيا المواد الكمومية.

إن ميكانيكا الكم في محاكاة المواد تعتبر جزءًا أساسيًا من رحلتنا في استكشاف أسرار الطبيعة على المستوى الدقيق، وتعزز فهمنا للتفاعلات والظواهر التي تحدث في عالم الذرات والجزيئات.

مراجع الفصل الاول

[1] I. N. Levine, D. H. Busch, and H. Shull, *Quantum chemistry*. Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2009.

[2] R. Dugas, *A history of mechanics*. Courier Corporation, 1988.

[3] H. Dowker and J. J. J. P. R. D. Halliwell, "Quantum mechanics of history: The decoherence functional in quantum mechanics," vol. 46, no. 4, p. 1580, 1992.

[4] A. Jensen, K. Riisager, D. V. Fedorov, and E. J. R. o. m. p. Garrido, "Structure and reactions of quantum halos," vol. 76, no. 1, p. 215, 2004.

[5] L. J. P. r. Bergé" ،Wave collapse in physics: principles and applications to light and plasma waves," vol. 303, no. 5-6, pp. 259-370, 1998.

[6] P. A. M. J. R. o. M. P. Dirac, "On the analogy between classical and quantum mechanics," vol. 17, no. 2-3, p. 195, 1945.

[7] D. Basov, R. Averitt, and D. J. N. m. Hsieh, "Towards properties on demand in quantum materials," vol. 16, no. 11, pp. 1077-1088, 2017.

[8] W. J. P. r. l. Yang, "Direct calculation of electron density in density-functional theory," vol. 66, no. 11, p. 1438, 1.991

[9] J. A. Pople and D. L. J. C. Beveridge, NY, "Molecular orbital theory," 1970.

[10] H. Van Houten, L. Molenkamp, C. Beenakker, C. J. S. S. Foxon, and Technology, "Thermo-electric properties of quantum point contacts," vol. 7, no. 3B, p. B215, 1992.

[11] T. G. J. a. p. q.-p. Draper, "Addition on a quantum computer," 2000.

[12] B. J. P. i. m. s. Schönfeld, "Local atomic arrangements in binary alloys," vol. 44, no. 5, pp. 435-543, 1999.

الفصل الثاني

تقنيات الحساب باستخدام Gaussian دراسة المواد

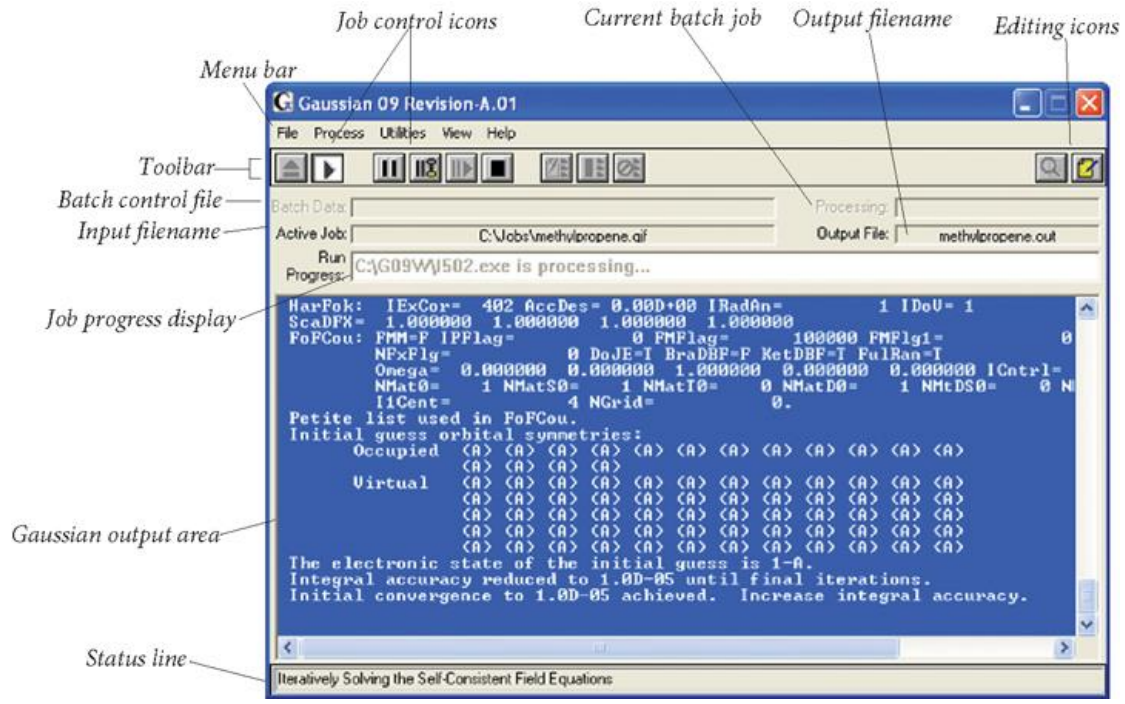
1.المقدمة:

يعتبر هذا الفصل دليلًا لاستخدام Gaussian 09W ويركز على واجهة المستخدم الخاصة به. يتم تنظيم المحتوى حسب النوافذ المختلفة (صناديق الحوار) داخل واجهة Gaussian 09W ، المعلومات العامة حول ميزات Gaussian والكلمات الرئيسية والأدوات[1].

2.استخدام برنامج G09W ومحتوياته:

1.2 نافذة معالجة المهام (النافذة الرئيسية):

نافذة معالجة المهام هي المكان الذي يتم من خلاله التحكم في مهام Gaussian 09W وتنفيذها وحيث يتم عرض مخرجاتها. يتم وصف أجزائه الرئيسية في الرسم التوضيحي التالي[2]:



الشكل II.1: نافذة معالجة المهام (النافذة الرئيسية)

1.1.2 قائمة الملف:

تتيح لك قائمة "ملف" إنشاء ملفات إدخال Gaussian 09W والوصول إليها وتعيين تفضيلات البرنامج.

جديد: قم بإنشاء إدخال Gaussian 09W جديد (موجود فقط في الذاكرة حتى يتم حفظه بشكل صريح على القرص).

فتح: افتح ملف إدخال Gaussian 09W موجود. امتداد ملف الإدخال Gaussian 09W هو. GJF. يمكن أيضًا استخدام عنصر القائمة فتح... لتحميل ملف تحكم دفعي موجود. وأخيرًا، يمكن استخدامه لفتح ملف PDB للتحويل.

تعديل: قم بتحرير الإدخال الحالي، عبر نافذة تحرير مهمة الملف الموجود.

الخروج: الخروج من Gaussian 09W.. سيُطلب منك ما إذا كنت تريد حفظ أي ملفات إدخال جديدة أو معدلة غير محفوظة بالإضافة إلى أي تغييرات غير محفوظة في التفضيلات.

2.1.2 قائمة العملية:

تسمح لك قائمة العمليات بمعالجة المهام المنفذة. تحتوي جميع عناصرها على أيقونات مكافئة في نافذة معالجة المهام.

بدء المعالجة: بدء في تنفيذ الإدخال الذي تم تحميله حاليًا.

إيقاف مؤقت: إيقاف تنفيذ المهمة الحالية فورًا.

استئناف: إعادة تشغيل مهمة تم إيقافها مؤقتًا

إلغاء المهمة: إلغاء تنفيذ المهمة الحالية على الفور. إذا كانت دفعة قيد التشغيل، فسيتم بدء تنفيذ المهمة التالية في الدفعة (مالم يتم تعيين تفضيل "إنهاء تشغيل الدفعة عند حدوث خطأ").

3.1.2 قائمة العرض:

تتحكم قائمة العرض في مظهر النافذة وتمكينك من استدعاء محرر نصوص خارجي. يمكن التحكم أيضًا في الإعدادات الافتراضية لخيارات العرض المختلفة من خلال التفضيلات. تحتوي الخيارات للتحرير أيضًا على مكافئات الرموز .

شريط الأدوات: يعمل على تبديل عرض جزء شريط الأدوات في النافذة. عندما يكون شريط الأدوات مرئيًا، يتم وضع علامة على هذا العنصر..

عرض الإخراج: يقوم بتبديل عرض منطقة عرض الإخراج في النافذة. عندما تكون منطقة عرض الإخراج مرئية، يتم وضع علامة على هذا العنصر.

شريط الحالة: يُقوم بتبديل عرض جزء شريط الحالة في النافذة، الذي يعرض وصفًا موجزًا لعنصر القائمة الحالي. عندما يكون شريط الحالة مرئيًا، يتم وضع علامة على هذا العنصر .

المحرر: استدعاء المحرر النصي الخارجي (الذي يتم تحديده في التفضيلات).

4.1.2 الرموز: توفر الرموز التالية في نافذة معالجة المهام (العنصر القائمة المعادل في الأقواس):

بدء تشغيل معالجة الملف الحالي أو ملف الدفعة (عملية: تشغيل).

إيقاف تشغيل العمل فوراً (العملية: إيقاف).

إيقاف التشغيل بعد الرابط الحالي (العملية: إيقاف ← الرابط التالي).

استئناف تنفيذ العمل المتوقف (العملية: استئناف).

إنهاء الوظيفة الحالية (العملية: إيقاف الوظيفة).

تحرير ملف التحكم في الدفعة الحالي، أو إنشاء واحد جديد إذا لم يتم تحميل أي ملف حتى الآن (الأدوات: تحرير قائمة الدفعات).

إنهاء الدفعة الجارية بعد اكتمال الوظيفة الحالية (العملية: إنهاء الدفعة).

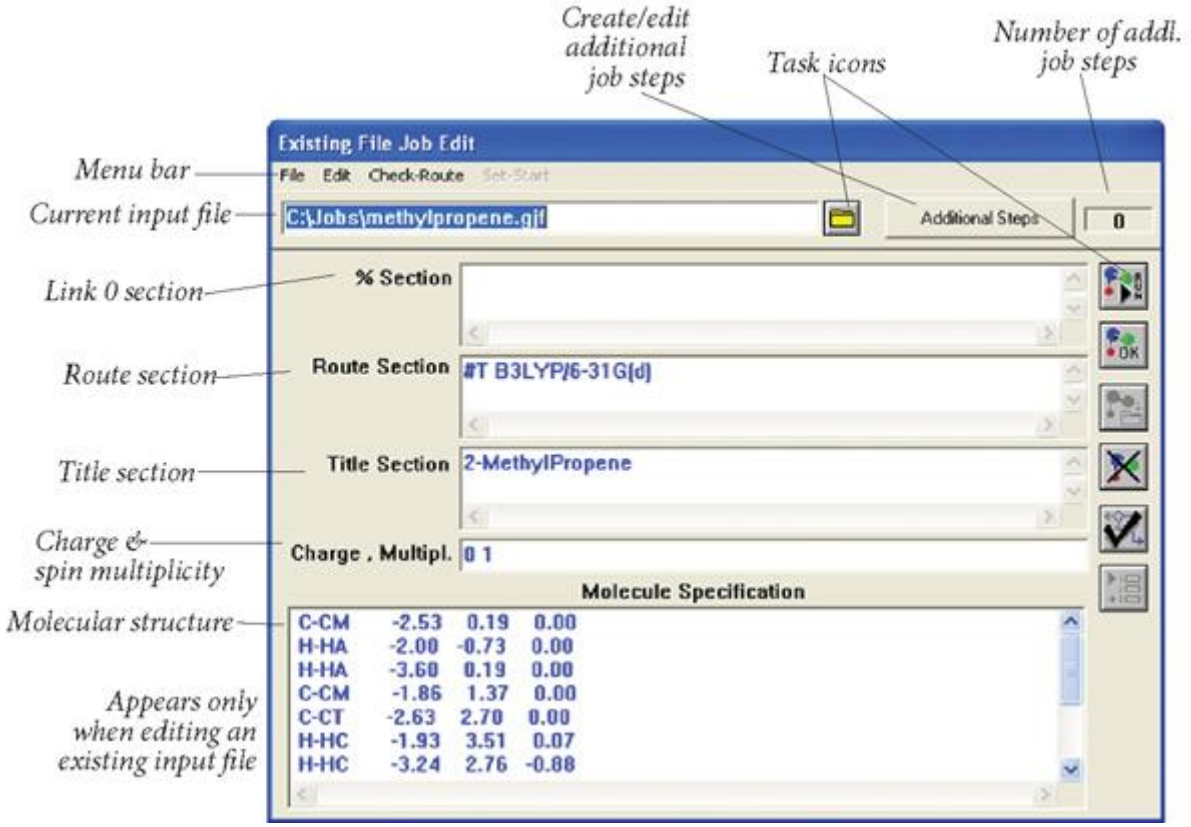
إلغاء الدفعة الحالية على الفور، مما يؤدي إلى إيقاف تشغيل الوظيفة الحالية (العملية: إيقاف الدفعة).

فتح المحرر الخارجي (عرض: المحرر).

تحرير ملف الإخراج الحالي. تأكد من إيقاف تشغيل المهمة المعملة أولاً (عرض: محرر ← ملف الإخراج).

2.2 نافذة تحرير الوظيفة:

تُستخدم هذه النافذة لإنشاء وتحرير ملفات الإدخال الخاصة ببرنامج Gaussian 09. تحتوي على عنوانين رئيسيين: "إدخال الوظيفة"، عند استخدامها لإنشاء ملف إدخال جديد، و "تحرير الوظيفة للملف الموجود"، عند استخدامها لتعديل ملف إدخال موجود بالفعل. يُلاحظ أن المدخلات الجديدة والتغييرات في ملفات الإدخال الحالية تُخزن في الذاكرة أثناء عملية التحرير - وبالتالي سيتم استخدامها عند بدء تنفيذ الوظيفة - ولكن يجب حفظها بوضوح على القرص الصلب[3].



الشكل II.2: نافذة تحرير الوظيفة

1.2.2 قائمة الملفات:

قائمة الملفات تتيح لك تحميل وحفظ ملفات الإدخال الخاصة ببرنامج Gaussian 09. بعض خياراتها لها رموز معادلة .

- **تحميل:** يقوم بتحميل ملف إدخال موجود (بامتداد .GJF)، مستبدلاً أي إدخال حالي. إذا كانت حقل اسم الملف ممتلئًا، سيتم تحميل هذا الملف. إذا كانت الحقل فارغًا، فسيُطلب منك تحديد الملف الذي تريد تحميله. يستبدل الملف المحمل أي إدخال حالي (بعد توجيه الحفظ إذا كان ذلك مطلوبًا).
- **حفظ الوظيفة:** يقوم بحفظ الإدخال الحالي في ملفه الأصلي (سيُطلب منك تحديد اسم الملف إذا كان الإدخال قد تم إنشاؤه حديثًا).
- **المحرر الخارجي:** يستدعي المحرر الخارجي للإدخال الحالي. يتم تحديد المحرر الخارجي عبر الخيارات.
- **تجاهل البيانات:** الخروج من هذه النافذة دون حفظ أي بيانات أو تغييرات.
- **خروج:** العودة إلى نافذة معالجة الوظائف. يتم الاحتفاظ بالإدخال الحالي ولكن لا يتم حفظه تلقائيًا.

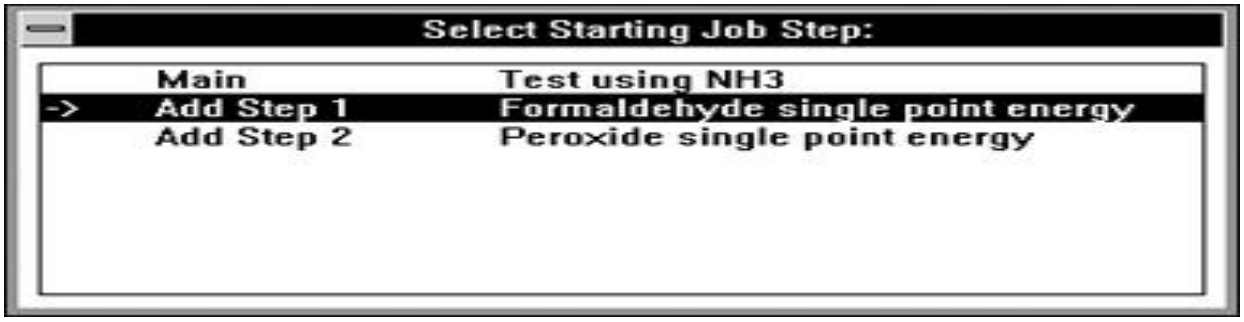
قائمة التحرير: تتضمن قائمة "تحرير" خيارات قائمة "تحرير" القياسية في Windows "تراجع" و"قص" و"نسخ" و"لصق" و"حذف". كما أن لديها هذا الخيار الإضافي:

مسح النموذج: يمسح جميع المعلومات في جميع أقسام النافذة. لا يتم إعطاء أي تحذير بشأن أية تغييرات غير محفوظة. يمكنك إنشاء ملف إدخال جديد من هذا النموذج عن طريق تحديد "مسح النموذج"، وإدخال الإدخال المطلوب، ثم حفظه.

2.2.2 خيار التحقق من المسار: يقوم بتشغيل أداة التحقق من المسار على الإدخال الحالي .

3.2.2 خيار تعيين البداية:

هذا الخيار يمكنك من تعيين خطوة البداية لهذا الملف المدخل بحيث القيمة الافتراضية هي الخطوة الرئيسية الاولى



الشكل **II**.3: خيار تعيين البداية

حدد خطوة البداية بالنقر المزدوج على الخطوة المطلوبة. اخرج من النافذة عن طريق اختيار إغلاق من قائمة النظام بالنافذة (يتم الوصول إليها عبر شريط الإغلاق الموجود في الزاوية اليسرى العليا).

4.2.2 الأيقونات: تتوفر الرموز التالية في نافذة تحرير المهمة (يوجد عنصر القائمة المكافئ بين قوسين):

العودة إلى القائمة الرئيسية وبدء تنفيذ المهمة (ملف ← الخروج والتشغيل).

العودة إلى القائمة الرئيسية (ملف ←الخروج).

حفظ كل الإدخالات الحالية على القرص (ملف ← حفظ المهمة).

تجاهل جميع البيانات المدخلة والعودة إلى القائمة الرئيسية (ملف ← تجاهل البيانات).

تشغيل أداة التحقق من المسار (التحقق- المسار).

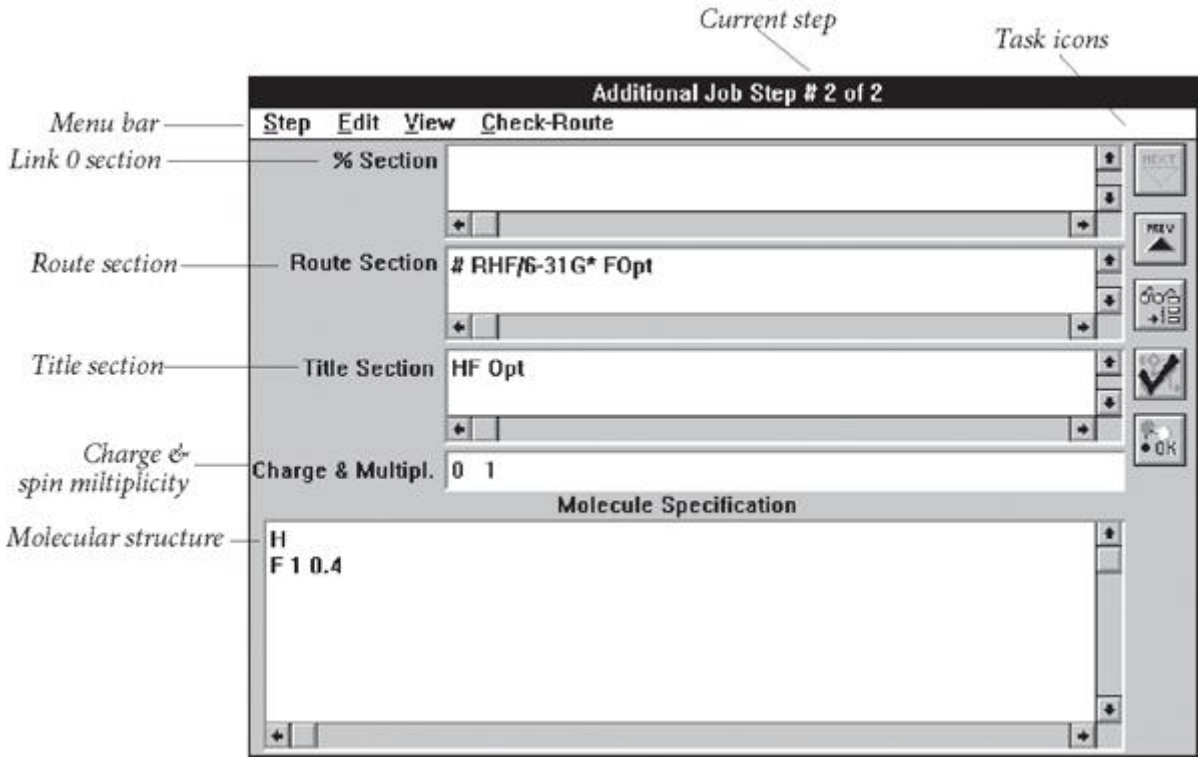
حدد خطوة بدء المهمة (تحديد-البداية).

5.2.2 زر الخطوات الإضافية:

ينقلك هذا الزر إلى نافذة خطوات المهمة الإضافية، الموضحة في القسم التالي. يشير حقل العرض الموجود على اليمين إلى عدد خطوات المهمة الإضافية ضمن هذه الوظيفة.

3.2 نافذة خطوات المهمة الإضافية:

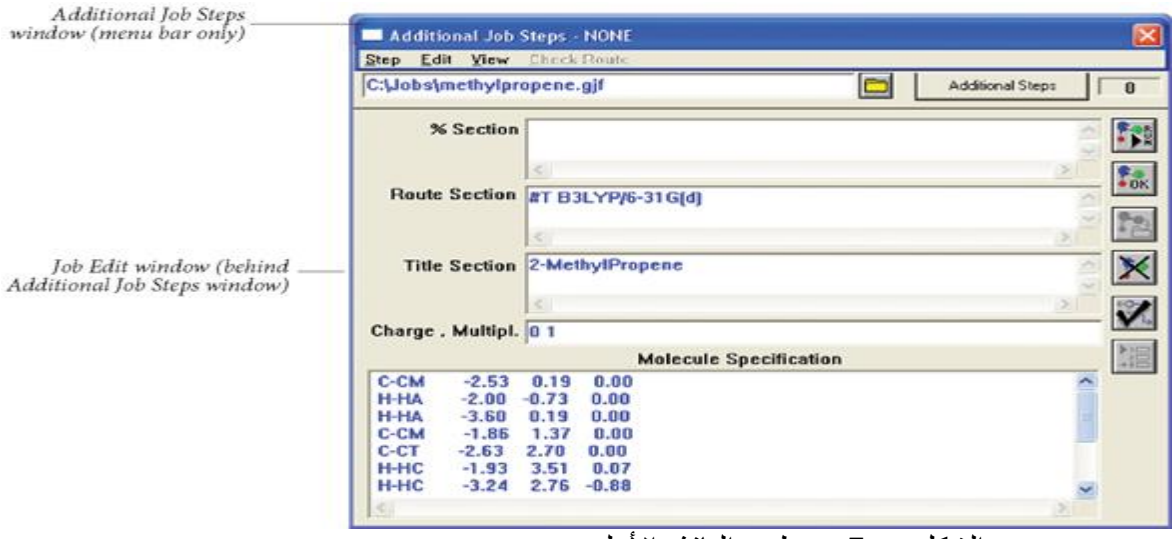
ستخدم نافذة الخطوات الإضافية للوظيفة لإنشاء وتحرير وظائف Gaussian 09 متعددة المكونات. يُلاحظ أنه لا يتم حفظ الملفات من هذه النافذة؛ يجب عمل الحفظ من نافذة تحرير الوظيفة.



الشكل II.4: نافذة خطوات المهمة الإضافية

1.3.2 مظهر النافذة الأولي:

عند الضغط على زر "الخطوات الإضافية" لملف الإدخال الذي يحتوي فقط على خطوة وظيفية واحدة، تتكون نافذة "الخطوات الإضافية للوظيفة" فقط من شريط القوائم الخاص بها:



الشكل II.5: مظهر النافذة الأولي

2.3.2 قائمة الخطوات: تُستخدم قائمة الخطوات لإنشاء، وإزالة، وإعادة ترتيب الخطوات الوظيفية.

إضافة خطوة: إنشاء خطوة جديدة بعد الخطوة الحالية. يتم نسخ محتويات قسم النسبة المئوية وقسم العنوان ومناطق الشحن والضرب من الوظيفة الرئيسية تلقائيًا إلى الخطوة الجديدة. يمكن تحريرها حسب الرغبة أثناء ملء المناطق الإضافية.

حذف الخطوة: قم بإزالة الخطوة الحالية من المهمة.

إعادة الترتيب: قم بتغيير ترتيب خطوات المهمة باستخدام نافذة إعادة ترتيب البيانات.

تحميل من ملف: استبدل الخطوة الحالية بالمهمة المخزنة في ملف خارجي (سيُطلب منك اسم الملف). إذا كان الملف يحتوي على أكثر من خطوة مهمة واحدة وكانت الخطوة الحالية هي خطوة المهمة الأخيرة، فسيتم تحميل كافة الخطوات من الملف بترتيبها الحالي.

الخروج: العودة إلى نافذة تحرير الوظيفة. يوجد أيقونة مكافئة لهذا العنصر في هذا القسم.

3.3.2 قائمة العرض: تسمح لك قائمة العرض بالتنقل بين خطوات الوظائف الإضافية ضمن الوظيفة الحالية. تحتوي عناصرها أيضًا على أيقونات مكافئة

الخطوة التالية: انتقل إلى الخطوة التالية (الرقم الأعلى) في الوظيفة.

الخطوة السابقة: انتقل إلى الخطوة السابقة في هذه الوظيفة.

اختر الخطوة: انتقل إلى رقم خطوة المهمة التي تحددها.

4.3.2 أيقونات:

تظهر الأيقونات التالية في نافذة خطوات المهمة الإضافية (يوجد عنصر القائمة المكافئ بين قوسين):

انتقل إلى خطوة المهمة التالية (عرض: الخطوة التالية).

الانتقال إلى خطوة المهمة السابقة (عرض: الخطوة السابقة).

الانتقال إلى رقم الخطوة المحدد (عرض: اختر الخطوة).

تشغيل أداة التحقق من المسار (التحقق- المسار).

ارجع إلى نافذة تحرير الوظيفة (الخطوة: الخروج).

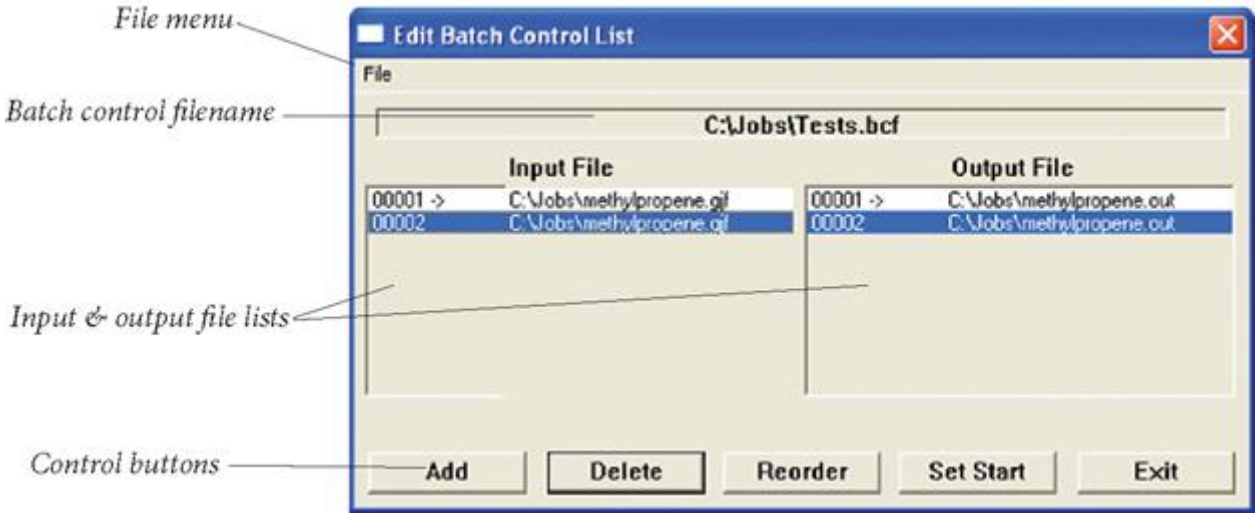
4.2 نافذة تحرير قائمة الدُفعات:

يتم استخدام نافذة تحرير قائمة الدُفعات لإنشاء وتعديل ملفات التحكم في الدُفعات، والتي لها الامتداد .BCF. تعد منشأة معالجة الدُفعات Gaussian 09W عبارة عن آلية للتنفيذ التسلسلي لملفات إدخال Gaussian 09 المتعددة تلقائيًا.

يمكن تحرير ملفات التحكم المجمعة من هذه النافذة أو باستخدام أي محرر نصوص. يمكن تحميل ملفات التحكم في الدُفعات الموجودة باستخدام خيار فتح... من قائمة ملف في نافذة معالجة المهام، أو من قائمة ملف في نافذة تحرير قائمة الدُفعات[4].

1.4.2 تحرير ملف التحكم بالدفعات:

نافذة تحرير قائمة الدفعات تتيح لك تحرير ملف التحكم بالدفعات من داخل Gaussian 09W:



الشكل II.6: نافذة تحرير قائمة الدفعات

يمكنك تغيير اسم أي مكون موجود من خلال النقر عليه مرتين ثم تحريره ضمن النافذة التي تظهر. يتم وصف عناصر القائمة والأزرار المختلفة بشكل فردي أدناه.

2.4.2 قائمة الملفات: قائمة الملفات تتيح لك إنشاء وحفظ ملفات التحكم بالدفعات.

جديد: إنشاء قائمة دفعات جديدة (مسح أي قائمة حالية أو أي مدخلات أخرى من الذاكرة).

فتح: فتح ملف تحكم بالدفعات موجود.

حفظ: حفظ قائمة الدفعات الحالية إلى ملفها الأصلي (سيتم طلب اسم الملف إذا كانت هذه قائمة جديدة).

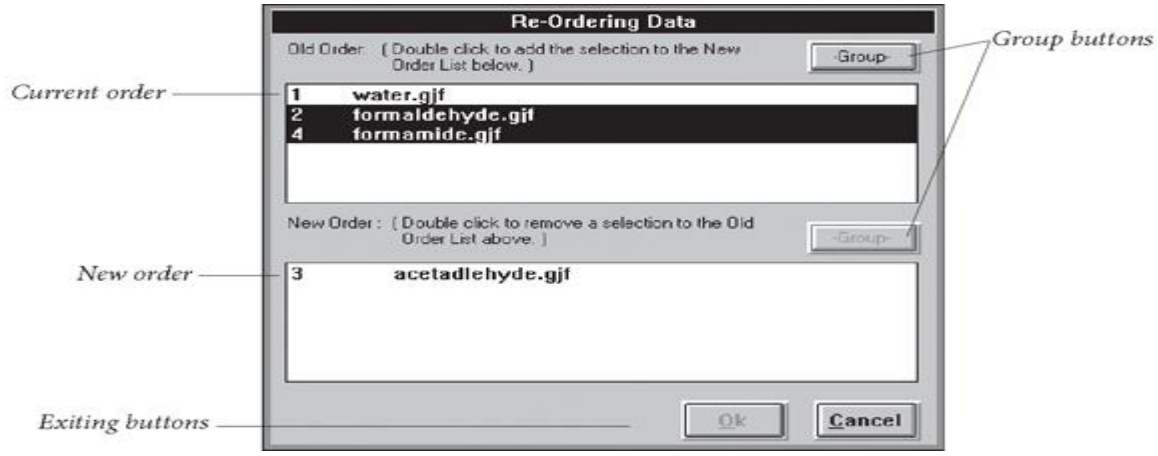
خروج: العودة إلى نافذة معالجة الوظائف (بعد طلب حفظ ما إذا لزم الأمر).

5.2 نافذة إعادة ترتيب البيانات:

تُستخدم نافذة إعادة ترتيب البيانات لتغيير ترتيب الإدخالات ضمن قائمة الدُفعات الحالية، عبر زر إعادة الترتيب في نافذة تحرير قائمة الدُفعات، الخطوات المهمة ضمن وظيفة الحالية، عبر عنصر إعادة الترتيب من قائمة الخطوة في النافذة خطوات المهمة الإضافية[5].

1.5.2 نقل عنصر واحد:

لنقل عنصر واحد من موقعه الحالي في النافذة العلوية إلى أسفل النافذة الأخرى، انقر عليه نقرًا مزدوجًا. سيؤدي النقر المزدوج على أي عنصر في النافذة السفلية إلى إعادته إلى موقعه الأصلي في النافذة العلوية.



الشكل II.7: توضح كيفية نقل عنصر واحد

2.5.2 نقل عدة عناصر باستخدام زر "التجميع".

استخدم الخطوات التالية لنقل عدة عناصر:

. حدد مجموعة من العناصر عن طريق الضغط باستمرار على مفتاح Shift أثناء النقر على العنصر الأول والأخير المطلوب. أو حدد أي مجموعة فرعية من العناصر الموجودة في القائمة بالضغط على مفتاح CTRL أثناء النقر فوق كل عنصر.

. انقر على زر "التجميع". عند الانتقال من النافذة العلوية إلى النافذة السفلية، يؤدي ذلك إلى نقل كافة العناصر المحددة، بترتيبها الحالي، إلى أسفل النافذة الأخرى؛ عند الانتقال من النافذة السفلية إلى النافذة العلوية، تتم استعادة العناصر إلى ترتيبها الأصلي.

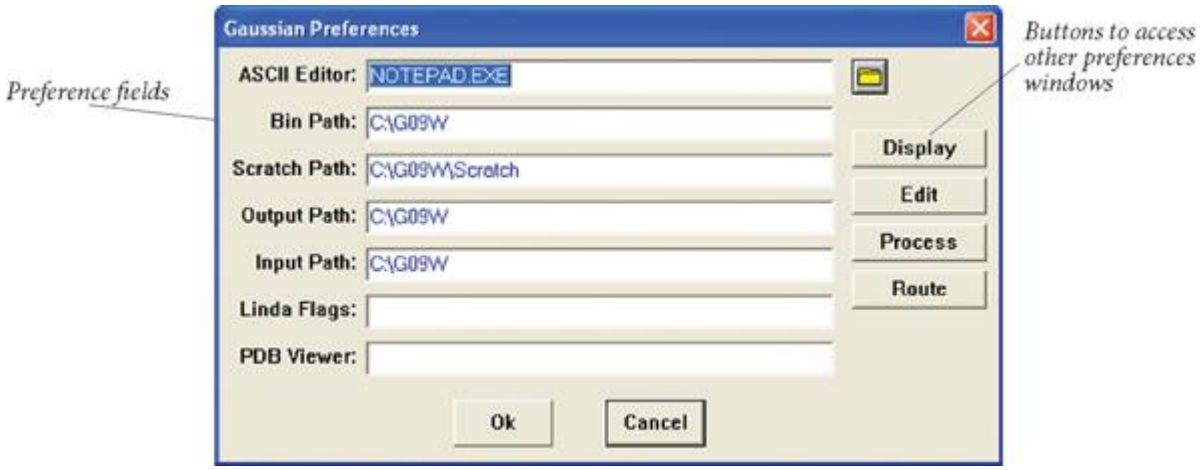
3.5.2 أزرار الخروج:

نعم: يعود إلى الشاشة الأصلية بعد إعادة ترتيب العناصر. يجب أن تكون جميع العناصر في نافذة الترتيب الجديدة حتى يكون هذا العنصر نشطًا.

إلغاء: يعود إلى الشاشة الأصلية، مع الاحتفاظ بترتيب العنصر الأصلي.

6.2 نافذة التفضيلات Gaussian 09W:

الخيار "التفضيلات" من قائمة "الملف" في نافذة "معالجة المهمة" يأخذك إلى نافذة "تفضيلات Gaussian". من هنا، يمكنك ضبط مختلف التفضيلات المتعلقة بمواقع الملفات والوصول إلى شاشات التفضيلات الأخرى[2].



الشكل II.8: نافذة التفضيلات Gaussian 09W

هذه هي الحقول في هذه النافذة:

محرر ASCII:.

المسار الكامل لمحرر النص الخارجي المطلوب. المحرر الافتراضي هو Windows Notepad.

مسار BIN:.

موقع الدليل للملفات القابلة للتنفيذ التابعة لبرنامج Gaussian 09W. القيمة الافتراضية هو موقع التثبيت (عادةً C:\G09W).

مسار Scratch:.

موقع الدليل لملفات في برنامج Gaussian 09W. الإعدادات الافتراضية هي الدليل الفرعي SCRATCH لموقع التثبيت (عادةً \G09W\SCRATCH).

.مسار الاخراج:

موقع الدليل الافتراضي لملفات الإخراج (لا يوجد افتراضي). إذا تم تحديد تفضيل اسم مخرجات الاستعلام، فسيتم تجاهل هذا الإعداد.

.مسار الإدخال:

موقع الدليل الافتراضي لملفات الإدخال (لا يوجد افتراضي).

.علامات Linda:

خيارات تُمرر إلى برنامج Linda أثناء العمليات المتوازية للمجموعة/الشبكة. يُرجى الرجوع إلى مناقشة متغير البيئة LINDA_FLAGS في مرجع المستخدم Gaussian 09 للمزيد من المعلومات.

.عارض PDB:

المسار الكامل لبرنامج عرض ملفات PDB المطلوب (لا يوجد قيمة افتراضية).

الأزرار الثلاثة العلوية في هذه النافذة تأخذك إلى شاشات التفضيلات الأخرى: "العرض" لتفضيلات العرض، "التحرير" لتفضيلات التحرير، و"المعالجة" لتفضيلات المعالجة.زر "المسار" يفتح ملف Default.Rou في النظام في المحرر النصي الخارجي المحدد.

1.6.2 نافذة تفضيلات العرض:

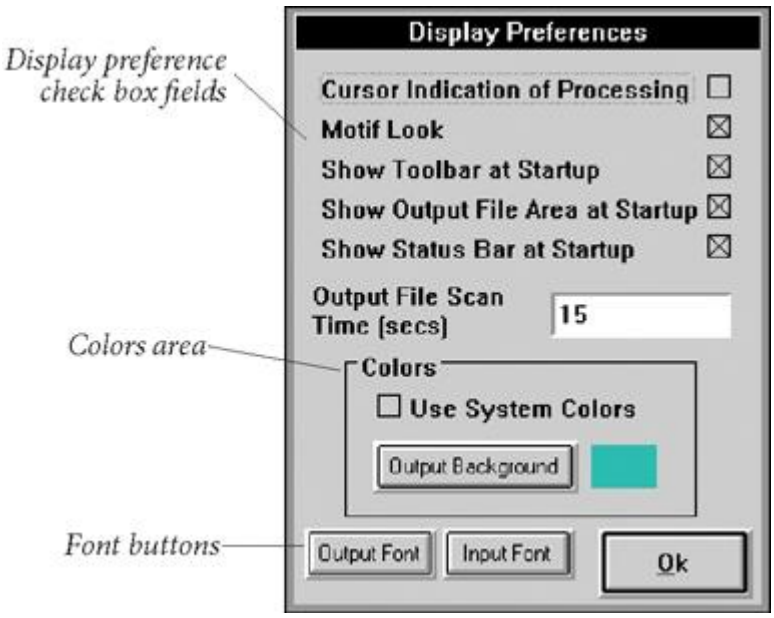
الحقول الموجودة في هذه النافذة تحمل المعاني التالية:

- **مؤشر إشارة المعالجة**

في حالة تحديده، يتغير المؤشر إلى ساعة رملية عندما يتحكم ارتباط Gaussian 09W في وحدة المعالجة المركزية (لم يتم تحديد الإعداد الافتراضي).

- **مظهر Motif:**

إذا تم التحقق منه، تفترض النوافذ مظهرًا رماديًا ثلاثي الأبعاد شبيه بالمعدن (افتراضيًا). إذا كان غير محدد، فستكون النوافذ ذات مظهر "مسطح" وتلوين قياسي لنظام Windows.



الشكل **II**.9: مظهر Motif

- إظهار شريط الأدوات عند بدء التشغيل

- التحكم في ظهور شريط الأدوات في نافذة معالجة المهام (يتم تحديده افتراضيًا).

-إ ظهار منطقة ملف الإخراج عند بدء التشغيل

- يتحكم في ما إذا كان سيتم عرض ملف الإخراج في نافذة معالجة المهام أم لا (يتم تحديده افتراضيًا) وقت مسح ملف الإخراج.

- تحديث منطقة عرض ملف الإخراج بشكل دوري، بالثواني (افتراضي = 15).

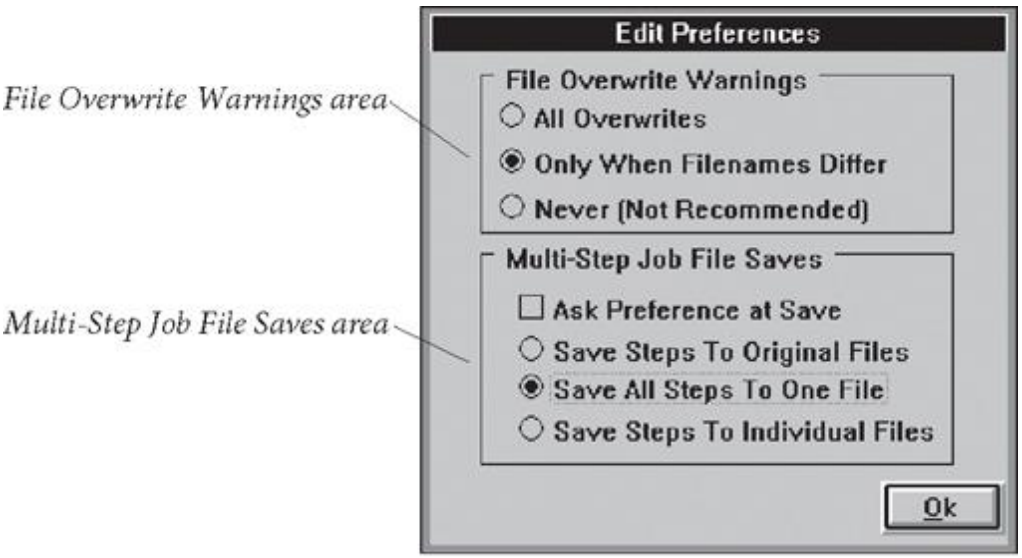
❖ **أزرار الخطوط**:

يُسمح لك باختيار الخط المستخدم لإخراج Gaussian 09W من صندوق حوار اختيار الخطوط القياسية لنظام Windows. القيمة الافتراضية هي نوع البريد السريع الجديد المكون من 9 نقاط. تُعطّل محدد اللون للنص داخل هذا الصندوق عندما يتم التحقق من خيار "استخدام ألوان النظام".

زر الخط للإدخال:

يُسمح لك باختيار الخط المستخدم لجميع مناطق الإدخال داخل Gaussian 09W من صندوق حوار اختيار الخطوط القياسي لنظام Windows. القيمة الافتراضية هي الخط النظامي. يُعطّل محدد اللون للنص داخل هذا الصندوق دائمًا.

2.6.2 نافذة تفضيلات التحرير:



الشكل II.10: نافذة تفضيلات التحرير

❖ **منطقة تحذيرات الكتابة فوق الملف**: تحدد هذه المنطقة متى تظهر تحذيرات الكتابة فوق الملف، حسب الخيار الذي يتم تحديده من بين هذه الخيارات الثلاث:

- مطالبة جميع عمليات الكتابة الفوقية.

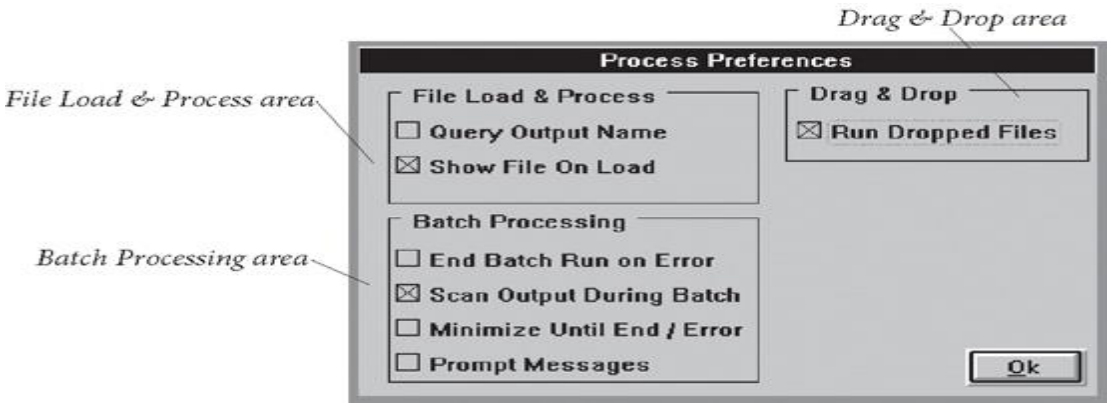
- المطالبة في أي وقت سيتم فيه الكتابة فوق الملف (افتراضي)، تطلب فقط عندما تختلف أسماء الملفات الحالية والجديدة ويكون الملف الجديد موجودًا بالفعل.

- أبدًا لا تطلب أبدًا عند الكتابة فوق الملف.

❖ **منطقة حفظ ملف المهمة متعدد الخطوات**: هذه المنطقة تتحكم في كيفية حفظ الخطوات المنفصلة داخل ملفات المهام متعددة الخطوات قي طلب التفضيلات عند الحفظ، ما إذا كان سيتم المطالبة بنظام الحفظ أم لا عند حفظ ملف متعدد الخطوات، يتم التحقق من الافتراضيحسب النقاط التالية :

- حفظ الخطوات في الملف الأصلي
- يحفظ كل الخطوات في الملف الأصلي الذي جاءت منه.
- حفظ جميع الخطوات في ملف واحد
- يحفظ جميع الخطوات في الملف الرئيسي للمهمة.
- حفظ الخطوات في ملفات فردية
- يحفظ كل خطوة في ملفها الخاص.

3.6.2 نافذة تفضيلات العملية:



الشكل II.11: نافذة تفضيلات العملية

❖ **منطقة تحميل الملف والعملية**:

تحدد هذه المنطقة سلوك البرنامج المتعلق بملفات الإخراج .باستعلام اسم الإخراج إذا تم تحديده (الافتراضي)، فسيقوم البرنامج بالاستعلام عن اسم ملف الإخراج قبل بدء مهمة (وسيتم تجاهل أي موقع تم تعيينه في تفضيل مسار الإخراج). وبخلاف ذلك، فإنه يستخدم اسم ملف الإدخال مع امتداد.OUT ثم

إظهار الملف عند التحميل ما إذا كان سيتم فتح نافذة تحرير المهمة أم لا بعد تحميل ملف إدخال (يتم تحديده افتراضيًا).

❖ **منطقة معالجة الدفعات**:

إنهاء تشغيل الدفعة عند حدوث خطأ: سواءً كان يجب أو لا يجب إنهاء الدفعة عند حدوث خطأ في المهمة الفردية (محدد افتراضيًا).

مسح الإخراج أثناء الدفعة: سواء كان يجب أو لا يجب عرض الإخراج في نافذة معالجة المهمة أثناء تنفيذ الدفعة (محدد افتراضيًا).

تصغير حتى النهاية/الخطأ: سواء كان يجب أو لا يجب تصغير البرنامج تلقائيًا عند بدء تنفيذ الدفعة وحتى ينتهي تنفيذها (غير محدد افتراضيًا).

رسائل التنبيه: سواء كان يجب أو لا يجب استمرار ظهور تحذيرات الكتابة فوق ملف الإخراج وغيرها من الرسائل غير القابلة للتجاوز أثناء معالجة الدفعة (غير محدد افتراضيًا).

7.2 أدوات Gaussian 09W:

يتم تضمين عدد من برامج الأدوات مع Gaussian 09W. يمكن الوصول إليها عبر العناصر المختلفة في قائمة الأدوات في النافذة الرئيسية للبرنامج[6].

❖ **أداة CubeGen**:

تقوم هذه الأداة بإنشاء ملف مكعب (Cube file) من المعلومات المخزنة في ملف نقطة التفتيش (checkpoint file) الخاص بـ Gaussian 09W، بطريقة مشابهة للمفتاح Cube. وتطلب منك المعلومات المطلوبة:

❖ **أداة FreqChk**:

يتم استخدام FreqChk لإنشاء بيانات التردد والكيمياء الحرارية من ملف نقطة تفتيش.

❖ **أداة FormChk**:

تنتج هذه الأداة ملف نقطة تفتيش بتنسيق ASCII من ملف نقطة تفتيش Gaussian 09W. تعد ملفات نقاط التفتيش المنسقة هي الطريقة الموصى بها لنقل البيانات إلى الرسومات وبرامج ما بعد المعالجة الأخرى .

❖ **أداة UnFchk**:

هذه الأداة هي العكس التام لأداة FormChk. إذ تقوم بتحويل ملف نقطة التفتيش المهيأ بتنسيق إلى ملف نقطة تفتيش ثنائي Gaussian 09W.

❖ **أداة ChkChk**:

هذه الأداة تعرض أقسام المسار والعنوان المتوافقة مع ملف نقطة التفتيش وتشير إلى المعلومات الأخرى المتوفرة ضمنه.

❖ **أداة C8609**:

تقوم هذه الأداة بتحويل ملفات نقاط التفتيش الثنائية بين التنسيقات المستخدمة بواسطة Gaussian 09W وإصدارات البرنامج السابقة. لاحظ أن الإخراج من C8609 ليس المقصود منه أن يكون قابلاً للقراءة. استخدم الأداة FormChk لإنتاج ملفات نقاط تفتيش منسقة يمكن قراءتها بواسطة الإنسان والبرنامج.

3. تحضير ملفات الإدخال:

1.3 نظرة عامة على إدخال برنامج Gaussian 09:

يتكون الإدخال Gaussian 09 من سلسلة من الأسطر في ملف نصي ASCII، يتضمن الهيكل الأساسي لملف الإدخال Gaussian عدة أقسام مختلفة:

- أوامر الرابط 0: تحديد وتسمية ملفات الخزانة (وليس إنهاء السطر الفارغ).
- قسم المسار (# الأسطر): تحديد نوع الحساب المطلوب، والكيمياء النموذجية، وخيارات أخرى (تم إنهاء السطر الفارغ).
- قسم العنوان: وصف موجز للحساب (تم إنهاء السطر الفارغ). هذا القسم مطلوب في الإدخال، ولكنه لا يتم تفسيره بأي شكل من الأشكال من قبل برنامج Gaussian 09.. يظهر في

الإخراج لأغراض التعرف والوصف. عادةً، قد يحتوي هذا القسم على اسم المركب، وتناظره، والحالة الإلكترونية، وأي معلومات أخرى ذات الصلة. يجب ألا يتجاوز قسم العنوان خمسة أسطر ويجب أن يتبعه سطر فارغ منتهي. يجب تجنب الأحرف التالية في قسم العنوان: @ # ! - _ \ وحروف التحكم (خاصة Ctrl-G).

- مواصفات الجزيء: تحديد النظام الجزيئي المراد دراسته (تم إنهاء السطر الفارغ).
- أقسام إضافية اختيارية: مدخلات إضافية مطلوبة لأنواع وظائف محددة (عادةً ما يتم إنهاء السطر الفارغ).

كثير من الوظائف في Gaussian 09 ستتضمن القسمين الثاني والثالث والرابع فقط[7].

يعرض الجدول التالي بعض الأقسام المحتملة التي قد تظهر ضمن ملف إدخال Gaussian 09، بالإضافة إلى الكلمات الأساسية المرتبطة بكل قسم:

الجدول **II**. 1: الأقسام المحتملة التي قد تظهر ضمن ملف إدخال Gaussian 09

Section	**Keywords**	**Final blank line?**
Link 0 commands	% commands	No
Route Section (# lines)	All	Yes
Extra Overlays	**ExtraOverlays**	Yes
Title section	all except **Geom=AllCheck**	Yes
Molecule	all except **Geom=AllCheck**	Yes

specification		
Connectivity specifications	**Geom=Connect** or **ModConnect**	Yes
Alterations to frozen atoms	**Geom=ReadFreeze**	Yes
Modifications to coordinates	**Opt=ModRedundant**	Yes
2nd title and molecule specification	**Opt=QST2** or **QST3**	yes for both
Connectivity specs. for 2nd set of coordinates	**Geom=Connect** or **ModConnect** and **Opt=QST2** or **QST3**	Yes
2nd Alterations to frozen atoms	**Geom=ReadFreeze**	Yes
Modifications to 2nd set	**Opt=QST2** or **QST3**	Yes

of coordinates		
3rd title and initial TS structure	**Opt=QST3**	yes for both

2.3 أنواع الوظائف Gaussian 09:

يحدد قسم المسار لملف الإدخال Gaussian 09 نوع الحساب الذي سيتم إجراؤه، هناك ثلاثة مكونات رئيسية لهذه التحديد: .نوع الوظيفة .طريقة .مجموعة الأساس[8].

النقاط التالية تعرض أنواع الوظائف المتاحة في برنامج Gaussian 09:

- SP: تقدير نقطة الطاقة الفردية.

- Opt: تحسين الشكل الهندسي.

- Freq: تحليل التردد والكيمياء الحرارية.

-IRC : متابعة مسار التفاعل.

- IRCMax: العثور على أقصى طاقة على مسار تفاعل معين.

- مسح: مسح سطح الطاقة المحتمل.

القطبية: الاستقطابية وفرط الاستقطاب.

- ADMP و BOMD: حساب مسار الديناميكا المباشرة.

القوة: حساب القوى المؤثرة على النوى.

مستقر: اختبار استقرار الدالة الموجية.

الحجم: حساب الحجم الجزيئي.

3.3 الكيمياء النموذجية:

تم تحديد الكيمياء النموذجية من خلال مجموعة الطريقة ومجموعة القاعدة، مما يحدد مستوى النظرية في برنامج Gaussian. يجب على كل وظيفة في Gaussian تحديد كل من طريقة ومجموعة القاعدة. وغالبًا ما يتم ذلك من خلال كلمتين رئيسيتين مختلفتين ضمن قسم المسار في ملف الإدخال، على الرغم من أن بعض كلمات الأساسية للطريقة تعني اختيار مجموعة القاعدة، بعض الوظائف باستخدام طريقة الدالة الكثافية قد تتضمن أيضًا مجموعة للتجانس الكثافة الجدول التالي يوضح الطرق المتاحة في Gaussian ، مع أنواع الوظائف التي يمكن استخدام كل منها مع العلم أن تشير النجمة إلى الحسابات التحليلية، بينما تُشير الحسابات الرقمية فقط بـ n[9].

الجدول **II**.2 : يوضح الطرق المتاحة في Gaussia.

Method Availabilities in Gaussian 09

	SP, Scan	Opt, Force, BOMD	Freq	IRC	ADMP	Polar	Stable	ONIOM	SCRF	PBC
Molecular Mechanics methods	*	*	*					*	*	
AM1, PM3, PM3MM, PM6, PDDG	*	*	*	*		*	*	*	*	
HF	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
DFT methods	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
CASSCF	*	*	*	*		*		*	*	
MP2	*	*	*	*		*		*	*	
MP3, MP4(SDQ)	*	*	*num*	*		*num*		*	*	
MP4(SDTQ), MP5	*	*num*						*		
QCISD, CCD, CCSD	*	*	*num*	*		*num*		*	*	
QCISD(T) or (TQ)	*	*num*						*		
BD	*	*						*	*	
EPT	*							*		
CBS, G*n*, W1 methods	*									
CIS	*	*	*	*		*		*	*	
TD	*	*	*num*	*		*num*		*	*	
EOM	*	*num*						*	*	
ZINDO	*							*	*	
DFTB	*	*	*	*		*		*		
CI	*	*		*				*		
GVB	*	*		*				*		

*=Analytic algorithm available *num*=Available via numerical differentiation

4.3 مجموعات الأساس:

تتطلب معظم الأساليب تحديد مجموعة أساس، إذا لم يتم تضمين أي كلمة أساسية لمجموعة الأساس في قسم المسار، فسيتم استخدام أساس STO-3G. تتكون الاستثناءات من عدد قليل من الأساليب التي يتم تعريف مجموعة الأساس لها على أنها جزء لا يتجزأ من الطريقة، وهي مدرجة أدناه:

- جميع الطرق شبه التجريبية، بما في ذلك ZIndo للحالات المثارة.

- جميع طرق الميكانيكا الجزيئية.

- نماذج الكيمياء المركبة، جميع طرق Gn و CBS و W1.

- يتم تخزين مجموعات الأساس التالية داخليًا في برنامج Gaussian 09، حسب الكلمة الأساسية المقابلة في Gaussian 09.

- رباعية وخماسية زيتا وسداسية زيتا) ، على التوالى. تمت إزالة الوظائف الزائدة عن الحاجة لهذه المجموعات الأساسية وتم تدويرها من أجل زيادة الكفاءة الحسابية.

- تتضمن مجموعات الأساس هذه وظائف الاستقطاب حسب التعريف، يسرد الجدول التالي وظائف استقطاب التكافؤ الموجودة لمختلف الذرات المدرجة في مجموعات الأساس هذه:

الجدول II.3 : وظائف استقطاب التكافؤ الموجودة لمختلف الذرات المدرجة في مجموعات الأساس.

Atoms		cc-pVDZ		cc-pVTZ		cc-pVQZ		cc-pV5Z		cc-pV6Z
H		2s,1p		3s,2p,1d		4s,3p,2d,1f		5s,4p,3d,2f,1g		6s,5p,4d,3f,2g,1h
He		2s,1p		3s,2p,1d		4s,3p,2d,1f		5s,4p,3d,2f,1g		*not available*
Li-Be		3s,2p,1d		4s,3p,2d,1f		5s,4p,3d,2f,1g		6s,5p,4d,3f,2g,1h		*not available*

B-Ne		3s,2p,1d		4s,3p,2d,1f		5s,4p,3d,2f,1g		6s,5p,4d,3f,2g,1h		7s,6p,5d,4f,3g,2h,1i
Na-Ar		4s,3p,1d		5s,4p,2d,1f		6s,5p,3d,2f,1g		7s,6p,4d,3f,2g,1h		*not available*
Ca		5s,4p,2d		6s,5p,3d,1f		7s,6p,4d,2f,1g		8s,7p,5d,3f,2g,1h		*not available*
Sc-Zn		6s,5p,3d, 1f		7s,6p,4d,2f,1g		8s,7p,5d,3f,2g,1h		9s,8p,6d,4f,3g,2h,1i		*not available*
Ga-Kr		5s,4p,2d		6s,5p,3d,1f		7s,6p,4d,2f,1g		8s,7p,5d,3f,2g,1h		*not available*

يمكن تعزيز مجموعات الأساس هذه بوظائف منتشرة عن طريق إضافة بادئة AUG إلى الكلمة الأساسية لمجموعة الأساس (بدلاً من استخدام العلامة + و++ -).

5.3 نظرة عامة على مواصفات الجزيء:

يحدد قسم الإدخال هذا المواقع النووية وعدد الإلكترونات ذات الدوران α وβ. هناك عدة طرق يمكن من خلالها تحديد التكوين النووي: كمصفوفة Z، أو كإحداثيات ديكارتية، أو كخليط من الاثنين (لاحظ أن الإحداثيات الديكارتية هي مجرد حالة خاصة من المصفوفة Z).

يحدد السطر الأول من قسم مواصفات الجزيء الشحنة الكهربائية الصافية (عدد صحيح موقّع) وتعدد الدوران (عادةً عدد صحيح موجب). وبالتالي، بالنسبة للجزيء المحايد في الحالة المفردة، يكون الإدخال 0 - 1 مناسبًا. بالنسبة للأنيون الجذري، سيتم استخدام 1- 2 قد يكون من الضروري تضمين أزواج شحنة/دوران متعددة لبعض أنواع الحساب.

السطر الخاص بالشحنة والدوران هو الإدخال الوحيد المطلوب في مواصفات الجزيء إذا تم استخدام Geom=CheckPoint قد يتم حذف مواصفات الجزيء بالكامل (وقسم العنوان) من خلال تضمين Geom=AllCheck في قسم المسار.

ما تبقى من مواصفات الجزيء يعطي نوع العنصر والموقع النووي لكل ذرة في النظام الجزيئي[10].

4 . الكلمات الرئيسية في Gaussian 09 :

يتم ترتيب الكلمات الرئيسية بشكل عام حسب الترتيب الأبجدي، مع الاستثناءات التالية:

- يتم جمع جميع الكلمات الرئيسية المتعلقة بـ DFT تحت عنوان أساليب DFT.

- يتم وضع أوامر الرابط 0 بعد جميع الكلمات الرئيسية الأبجدية (أي بعد مناقشة ZIndo)، مما يشكل القسم قبل الأخير.

- تمت مناقشة الكلمات الأساسية المتعلقة بتحديد المسارات البديلة —ExtraLinks وExtraOverlays وNonStd وSkip وUse — في قسم تحديد المسارات غير القياسية. يتم أيضًا عرض المعلومات ذات الصلة في مناقشة الأداة المساعدة testrt.

في مناقشة كلمة رئيسية معينة، يتم إدراج الخيارات حسب الأهمية وتكرار الاستخدام، وليس حسب الترتيب الأبجدي الصارم. غالبًا ما يتم تقسيم قوائم الخيارات الكبيرة إلى مجموعات ذات وظائف مماثلة[2].

5. برامج الأدوات:

تتناول هذه القسم مجموعة متنوعة من برامج الأدوات المضمنة في Gaussian 09. يتم مناقشة برامج الأدوات بترتيب أبجدي داخل هذا الفصل.

تتوفر معظم برامج الأدوات لكل من إصدارات UNIX وWindows من Gaussian، القائمة التالية توضح البرامج المتاحة ووظائفها (العناصر المشار إليها بنجمة مدرجة في قائمة برامج الأدوات لـ Gaussian 09W):

c8609: تحويل ملفات نقاط التفتيش من إصدارات البرنامج السابقة إلى تنسيق Gaussian 09.

chkchk*: يعرض أقسام المسار والعنوان من ملف نقطة تفتيش.

cubegen*: هو برنامج مستقل يستخدم لإنشاء مكعبات بشكل منفصل.

cubman*: هو برنامج يتلاعب بمكعبات الكثافة الإلكترونية والإمكانات الكهروستاتيكية التي تم إنتاجها بواسطة برنامج Gaussian (مما يتيح إمكانية إضافتها وطرحها، وما إلى ذلك).

freqchk*: هو برنامج يقوم بطباعة بيانات التردد والكيمياء الحرارية من ملف نقطة التفتيش. يمكن تحديد النظائر البديلة ودرجة الحرارة والضغط وعامل القياس لتحليل الكيمياء الحرارية.

freqmem: هو برنامج يحدد متطلبات الذاكرة اللازمة لحسابات التردد.

Gauopt: هو برنامج يقوم بتنفيذ تحسينات على المتغيرات باستثناء الإحداثيات الجزيئية.

Ghelp: هو برنامج يوفر المساعدة عبر الإنترنت لبرنامج Gaussian.

mm : هو برنامج ميكانيكا جزيئية مستقل.

newzmat*: هو برنامج يقوم بتحويل بين مجموعة متنوعة من تنسيقات المواصفات الهندسية الجزيئية.

testrt*: هو برنامج يقوم بفحص صحة بنية قسم المسار وتوليد مسارات غير قياسية[11].

6. متغير البيئة GAUSS_MEMDEF:

يمكن استخدام متغير البيئة GAUSS_MEMDEF لزيادة الذاكرة المتاحة للأدوات التي لا توفر خيارًا لذلك بنفسها، يجب ضبط قيمته على الكمية المطلوبة من الذاكرة بالكلمات[12].

7. تشغيل Gaussian:

الأوامر التي يجب تنفيذها لتشغيل برنامج Gaussian على أنظمة الحاسوب القائمة على Unix يجب أن يتضمن تشغيل برنامج Gaussian الأنشطة التالية:

1. إنشاء مدخل Gaussian الذي يصف الحساب المطلوب.
2. تحديد مواقع الملفات المؤقتة المختلفة.
3. تحديد متطلبات الموارد.
4. بدء تنفيذ البرنامج، سواء في وضع التفاعلي أو الدفعي[13].

8. قيود البرنامج:

قيود الحجم المختلفة الموجودة داخل Gaussian 09 :

- الحد الأقصى لعدد الذرات هو 250,000.

- الحد الأقصى لإجمالي عدد الأغشية البدائية هو 750,000.

- الحد الأقصى لعدد الأغشية البدائية d وأعلى هو 250,000.

- الحد الأقصى لعدد الأغشية المُتعاقدة هو 250,000.

- الحد الأقصى لدرجة التقليص المسموح بها هو 100.

- يقتصر برنامج GVB على 100 مدارات مقترنة (وهو ليس قيدًا في الممارسة العملية).

- تم تصميم أبعاد NBO لـ 250.000 ذرة و10.000 وظيفة أساسية[14].

9.الختامة:

يمكن القول إن هذا الفصل يقدم نظرة شاملة على واجهة المستخدم لبرنامج Gaussian 09W، مع التركيز على النوافذ المختلفة وصناديق الحوار التي تشكل جزءًا أساسيًا من تجربة المستخدم. تم تنظيم المحتوى بطريقة تسهل على المستخدمين فهم كيفية التنقل في البرنامج واستخدام الأدوات المتاحة بشكل فعال.

مراجع الفصل الثاني

[1] V. L. Deringer, A. P. Bartók, N. Bernstein, D. M. Wilkins, M. Ceriotti, and G. J. C. R. Csányi, "Gaussian process regression for materials and molecules," vol. 121, no. 16, pp. 10073-10141, 2021.

[2] A. J. W. Frisch, USA, 25p, "gaussian 09W Reference "،vol. 470, 2009.

[3] I. Singh *et al.*, "Experimental and theoretical DFT (B3LYP, X3LYP, CAM-B3LYP and M06-2X) study on electronic structure, spectral features, hydrogen bonding and solvent effects of 4-methylthiadiazole-5-carboxylic acid," vol. 45, no. 13 ،pp. 1029-1043, 2019.

[4] A. R. J. J. o. c. c. Allouche, "Gabedit—A graphical user interface for computational chemistry softwares," vol. 32, no. 1, pp. 174-182, 2011.

[5] X. Wang *et al.*, "Genome-wide detection of enhancer-hijacking events from chromatin interaction data in rearranged genomes," vol. 18, no. 6, pp. 661-668, 2021.

[6] S. Sebastian, S. Sylvestre, N. Sundaraganesan, B. Karthikeyan, and S. J. H. Silvan, "Conformational analysis, molecular structure, spectroscopic, NBO, reactivity descriptors ،wavefunction and molecular docking investigations of 5, 6-dimethoxy-1-indanone: A potential anti Alzheimer's agent," vol. 8, no. 1, 2022.

[7] R. Prakash *et al.*, "Mars Science Laboratory entry, descent, and landing system overview," in *2008 IEEE Aerospace Conference*, 2008, pp. 1-18: IEEE.

[8] S. Huzinaga, J. Andzelm, E. Radzio-Andzelm, Y. Sakai, H. Tatewaki, and M. Klobukowski, *Gaussian basis sets for molecular calculations*. Elsevier, 2012.

[9] H. Tatewaki and T. J. T. J. o. c. p. Koga, "Contracted Gaussian-type basis functions revisited," vol. 104, no. 21, pp. 8493-8499, 1996.

[10] L. L. Strow, S. E. Hannon, S. De Souza-Machado, H. E. Motteler, D. J. I. T. o. G. Tobin, and R. Sensing, "An overview of the AIRS radiative transfer model," vol. 41, no. 2, pp.2003 ،313-303 .

[11] C. Liu, Z.-L. Wei, H.-R. Mu, W.-K. Dong, Y.-J. J. J. o. P. Ding, and P. A. Chemistry, "A novel unsymmetric bis (salamo)-based chemosensor for detecting Cu2+ and continuous recognition of amino acids," vol. 397, p. 112569, 2020.

[12] S. Motavas, "Optical absorption in carbon nanotubes," University of British Columbia, 2014.

[13] C. Biernacki, G. Celeux, G. J. C. S. Govaert, and D. Analysis, "Choosing starting values for the EM algorithm for getting the highest likelihood in multivariate Gaussian mixture models," vol. 41, no. 3-4, pp. 561-575, 2003.

[14] L. Zheng, L. Shen, L. Tian, S. Wang, J. Wang, and Q. Tian, "Scalable person re-identification: A benchmark," in *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision*, 201 ،5pp. 1116-1124.

الفصل الثالث

الدراسة الحاسوبية لتخليق إطارات معدنية عضوية (MOF) من Zn-EDTA واقتراح الأمثلية

1. المقدمة:

حظيت الإطارات المعدنية العضوية (MOFs) بالاهتمام الكبير في السنوات الأخيرة نظرًا لتطبيقاتها المتنوعة في تخزين الغازات، والتحفيز الحفازي، وتسليم الأدوية، والكشف. من بين مجموعات MOFsالمختلفة، تعتبر MOFs المبنية على الزنك واعدة بشكل خاص بسبب خصائص أيونات الزنك المواتية للكيمياء التناسقية. حمض الإيثيلين دياميين تترا أسيتيك (EDTA) هو ليجاند متعدد الاستخدامات يستخدم عادة في تخليق MOFs بسبب قدرته على تشكيل مركبات مستقرة مع أيونات المعادن. في هذا الفصل، نقدم دراسة حاسوبية لعملية تخليق إطار معدني عضوي من Zn-EDTA ونقترح شروط تفاعل محسنة بناءً على النمذجة النظرية[1].

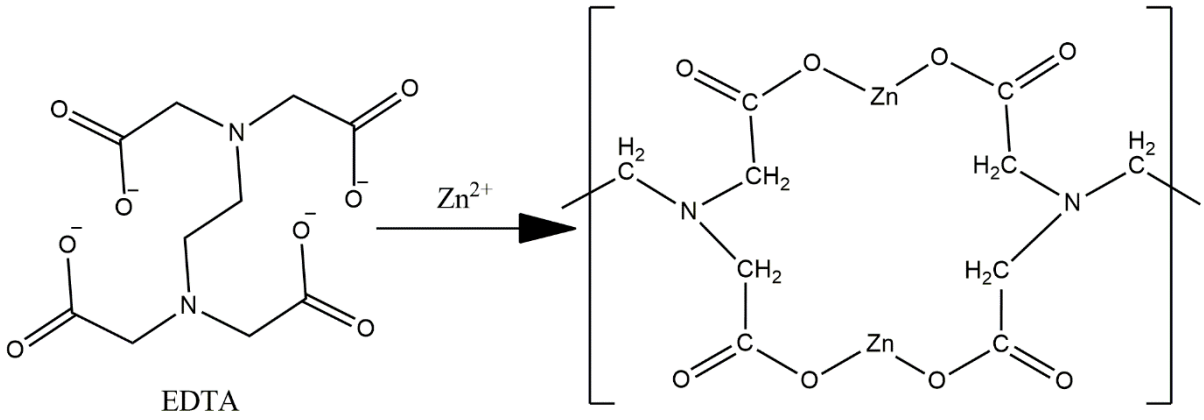
2. الطرق الحاسوبية :

تلعب تقنيات الكيمياء الحاسوبية دورًا حاسمًا في فهم آليات التخليق وتحسين شروط التفاعل لـ MOFs يتم استخدام حسابات نظرية للكثافة الوظيفية (DFT) بشكل شائع لدراسة الهندسة، والديناميكية الطاقية، والخصائص الإلكترونية لهياكل .MOF في هذه الدراسة، استخدمنا حسابات DFT مُنفذة في حزم برمجيات مثل Gaussian أو VASP لدراسة تكوين MOF منZn-EDTA .

مسار التخليق :يشمل تخليق MOF من Zn-EDTA عادةً تنسيق أيونات الزنك مع ليجاندات EDTA لتشكيل إطارات معدنية عضوية. يمكن تقسيم مسار الرد إلى عدة خطوات رئيسية[2]:

1. **إعداد الليجاندات :**يتم إعداد ليجاندات EDTA أولاً عن طريق إزالة البروتونات من حمض الإيثيلين دياميين تترا أسيتيك لتشكيل أيونات .-EDTA^4 تعمل هذه الليجاندات كوكلاء تشيلينج مع أيونات الزنك.
2. **تنسيق المعدن :**يتم إدخال أيونات الزنك في خليط التفاعل، حيث تتنسق مع ليجاندات EDTA لتشكيل مركبات .Zn-EDTA يتم استكشاف الهندسة التنسيقية والتوافقية التي تربط أيونات الزنك مع ليجاندات EDTA بشكل حاسوبي لفهم استقرار هيكل MOF الناتج.
3. **تشكيل الإطار :**تتفاعل مركبات Zn-EDTA مع بعضها البعض لتشكيل إطارات موسعة من خلال روابط التنسيق بين أيونات المعادن ومجموعات الكربوكسيلات لليجاندات .EDTA يتم استكشاف الديناميكية الطاقية لتشكيل الإطار واستقرار متعدد الشكلين باستخدام حسابات.DFT

4. **التبلور** :أخيرًا، تخضع المكونات المبدئية لـ MOF غير المتبلورة لعملية تبلور لتكوين هياكل بلورية معرفة جيدًا. تتم دراسة العوامل التي تؤثر على عملية التبلور، مثل اختيار المذيب، ودرجة الحرارة، وزمن التفاعل بشكل حاسوبي لتحسين شروط التخليق (الشكل الموالي).



الشكل **III**.1: مخطط تفصيلي للتخليق الاصطناعي للبوليمرات المتضافرة ذات المعدن MOF $(C_{10}H_{12}N_2O_8Zn_2)_n$

3. حسابات الطاقة :

هناك عدة طرق للحساب ضمن برنامج Gaussian نذكر منها:

DFT

ومن القواعد المستخدمة B3LYP/3-21G هي واحدة من الطرق الحسابية الشائعة في الكيمياء الحاسوبية لدراسة الهياكل الجزيئية والتفاعلات الكيميائية. إليك شرحًا لكل جزء من الطريقة:

1. B3LYP

- B3LYPهي اختصار لـ ."Becke, 3-parameter, Lee-Yang-Parr" إنها طريقة تقريبية تعتمد على نظرية الدالة الكثافية الوظيفية (DFT) لحساب الخصائص الإلكترونية للجزيئات.
- تم تطوير طريقة B3LYP لتوفير توازن جيد بين دقة الحساب والتكلفة الحسابية. إنها توفر تقديرًا جيدًا للطاقات والهياكل الجزيئية مع تكلفة حسابية معقولة.

2. 3-21G

- 3-21G هو مجموعة أساس قياسية تُستخدم لتمثيل الإلكترونات والنواة في الجزيئات.
- تتألف مجموعة الأساس 3-21 G من ثلاثة نوى (3) واثنا عشر (12) دالة موجية أساسية، (G) يتم استخدام هذه الدوال الأساسية لوصف الحركة الإلكترونية في الجزيء.

4. طريقة semi-empirical PM6

هي أحد الطرق الحسابية المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية لتقدير الخصائص الإلكترونية والهياكل الجزيئية للجزيئات الكيميائية. تم تطوير PM6 كجزء من مجموعة من الطرق الشبه تجريبية (semi-empirical methods)، التي تعتمد على مجموعة من الافتراضات والمعادلات لتقدير تأثير الكيمياء الكمومية على الخواص الإلكترونية للجزيئات.

PM6هو اختصار لـ "Parametric Method 6". وهي تعتمد على مجموعة محددة من البارامترات التي تمثل التأثيرات الكمومية في الجزيئات، وتستخدم هذه البارامترات لتقدير الطاقة والهياكل للمركبات الكيميائية. يتم تصحيح البارامترات باستمرار باستخدام البيانات التجريبية لتحسين دقة النموذج[3].

من أهم مزايا:PM6

- ✓ كفاءتها الحسابية العالية، مما يسمح بمعالجة جزيئات كبيرة.
- ✓ قدرتها على توفير تقديرات مقبولة للطاقة والهياكل بالمقارنة مع الطرق الكمومية الأكثر تعقيدًا.
- ✓ سهولة تطبيقها واستخدامها للمبتدئين في مجال الكيمياء الحاسوبية.

5. حساب طاقة التفاعل

Reaction Energy= Products Energy-Reactants Energy

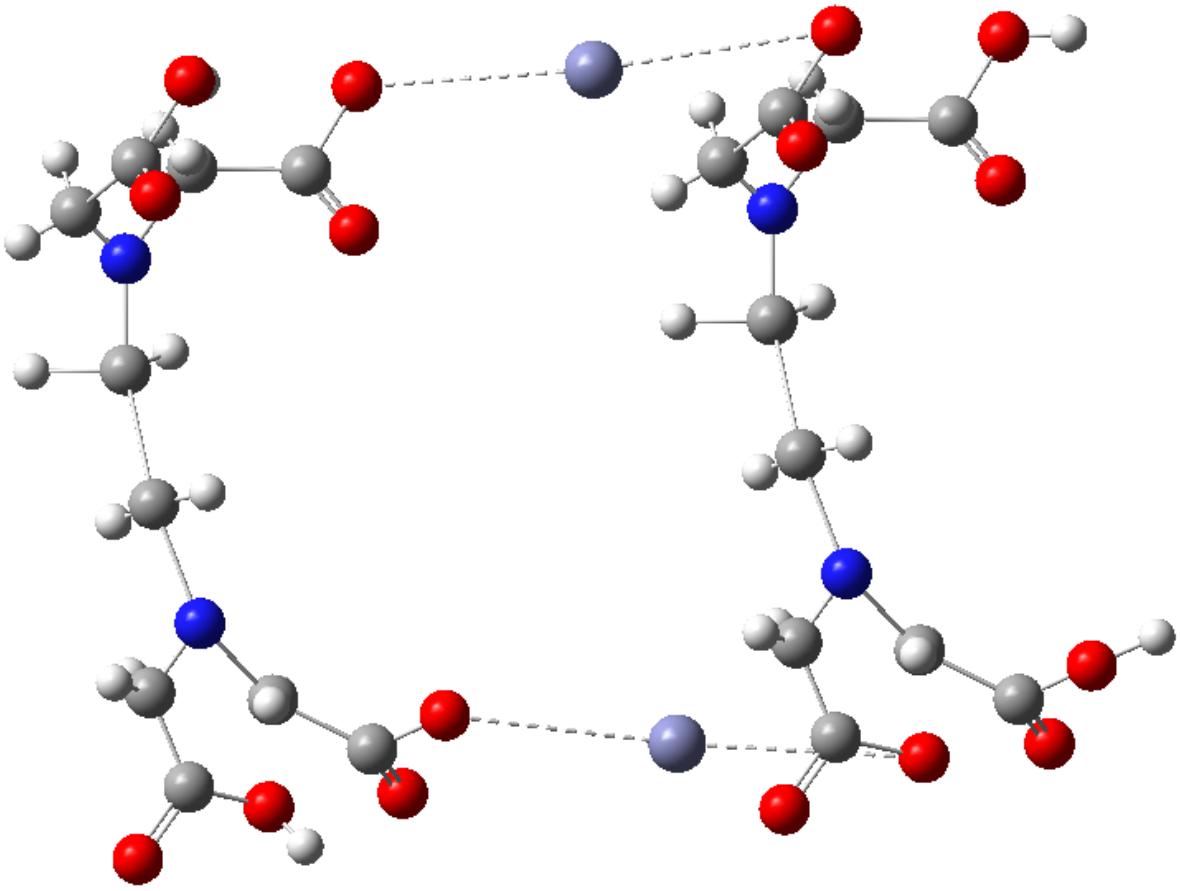
$= E_{MOF}-(E_{EDTA}+E_{Zn})= -1087.379396-(-1047.641939-1770.370726)$

Reaction Energy= 1730.633269 Hartree

تمثل هذا القيمة الإيجابية لطاقة التفاعل استجابة إيجابية لتشكيل المنتجات، مما يشير إلى أن عملية التفاعل تحدث بنشر الحرارة. وهذا يعني أن تفاعل تشكيل MOF من Zn-EDTA هو عملية إكزوثرمية Exothermic، أي أنه يتم تحرير الطاقة أثناء التفاعل.

طاقة الاندفاع النووي (Nuclear Repulsion Energy) "التي تبلغ **2968.8830635763** Hartrees تمثل الطاقة الناتجة عن الاندفاع بين النواة الموجبة في الذرات المختلفة في الجزيء. عندما يتم حساب الطاقة الإجمالية لجزيء متعدد الذرات، يتم تضمين هذه الطاقة كجزء من الطاقة الكلية.

تعتمد قيمة طاقة الاندفاع النووي على تباعد الذرات في الجزيء وعلى تأثيراتها المتبادلة. عندما تكون الذرات قريبة من بعضها البعض، يزداد التأثير التنافري بين النواة الموجبة، مما يؤدي إلى زيادة طاقة الاندفاع النووي[4].



الشكلIII.2 : يبين الشكل ثلاثي الأبعاد لجزيئة MOF .

يُعتبر حساب طاقة الاندفاع النووي جزءًا أساسيًا من حسابات الكيمياء الحاسوبية، حيث يُستخدم لتقدير الطاقة الكلية للجزيء والتنبؤ بالتفاعلات الكيميائية وخصائص الجزيئات.

النتائج الموالية تمثل بعض البيانات الناتجة عن حسابات الكيمياء الحاسوبية، ويتم تقديمها بتنسيق العدد العشري العائم(floating-point) ، والتي تُفسَّر على النحو التالي:

1. **N-N**

- هذه القيمة تمثل التباعد بين النواة في الجزيء. إذا كان الجزيء يحتوي على ذرتين من النيتروجين(N-N) ، فإن هذه القيمة تشير إلى المسافة بين النواتين بوحدات الهارتري. القيمة المُعطاة هي $2.968883063576 \times 10^3$ هارتري.

E-N .2

- هذه القيمة تُعبر عن الطاقة الإجمالية للنظام الذي يتألف من الإلكترونات والنوى (ذرات) في الجزيء. في هذه الحالة، يبدو أنه يتم تمثيل نظام يحتوي على النيتروجين (N) بوحدة سالبة، وربما تمثل هذه القيمة طاقة تفاعلية لتكوين الروابط بين النيتروجين والذرات الأخرى في الجزيء. القيمة المُعطاة هي $-1.691723000256 \times 10^4$ هارتري.

KE .3

- هذه القيمة تمثل الطاقة الحركية الكينتيكية للإلكترونات في النظام. تمثل هذه القيمة الطاقة التي تنتج عن حركة الإلكترونات في الجزيء. القيمة المُعطاة هي $4.602253089144 \times 10^3$ هارتري.

6. نتائج الكيمياء الحرارية

النتائج المبينة في الجدول أدناه تم الحصول عليها في درجة حرارة 25°C وضغط 1 atm:

الجدول ...: يبين أهم القيم الترموديناميكية للنظام

الجدول**III**.1: يبين أهم القيم الترموديناميكية للنظام

		Reactants		Product	Reaction
Model	Thermodynmic parametres	EDTA	Zn^{2+}	Zn-MOF	
					Δ H
	Enthalpy H (Hartree)	41.27357	0.395031	34.36	-7.3086
	Enthalpy H	25899.1	247.882	21560.	-

SE/PM6	**(Kcal/mol)**	7		9	4586.15
					Δ G
	Free Enthalpy G (Hartree)	41.23908	0.376138	34.36	-7.25522
	Free Enthalpy G (Kcal/mol)	25877.52	236.0266	21560.9	-4552.65
					Δ S
	(Entropy S (Cal/Mol Kelvin	72.593	39.762	76.866	-35.489
	CV (Cal/Mol Kelvin)	5.962	2.981	6.384	

يعرض الجدول المقدم المعلومات الثرموديناميكية لتفاعل يتضمن EDTA و Zn^{2+} لتكوين Zn-MOF (هيكل عضوي معدني). تم حساب الكميات الثرموديناميكية باستخدام نموذج المحاكاة الحسابيةSE/PM6 .

فيما يلي التفسيرات والاستنتاجات بناءً على البيانات:

1 .تغير الإنثالبي:(ΔH)

- تغير الإنثالبي للتفاعل هو -4586.15 كيلو كالوري/مول، وهي قيمة سالبة.
- تشير القيمة السالبة لتغير الإنثالبي إلى أن التفاعل طارد للحرارة، أي أنه يطلق حرارة إلى المحيط.
- تشير القيمة السالبة الكبيرة إلى أن تكوين ناتج الزنك-موف مفضل من منظور الإنثالبي.

2 .تغير طاقة جيبس الحرة:(ΔG)

- تغير طاقة جيبس الحرة للتفاعل هو -4552.65 كيلو كالوري/مول، وهي أيضًا قيمة سالبة.
- تشير القيمة السالبة لتغير طاقة جيبس الحرة إلى أن التفاعل تلقائي في الظروف المعطاة.
- تشير القيمة السالبة إلى أن تكوين ناتج الزنك-موف مفضل ثرموديناميكيًا وسيحدث بشكل تلقائي.

3 .تغير الأنتروبي (ΔS)

- تغير الترتيب للتفاعل هو -35.489 كالوري/مول·كلفن، وهي قيمة سالبة.

- تشير القيمة السالبة لتغير الترتيب إلى أن عشوائية أو فوضى النظام تنخفض أثناء التفاعل.
- غالبًا ما يرتبط انخفاض الترتيب بتكوين هيكل أكثر ترتيبًا، مثل ناتج الزنك-موف.

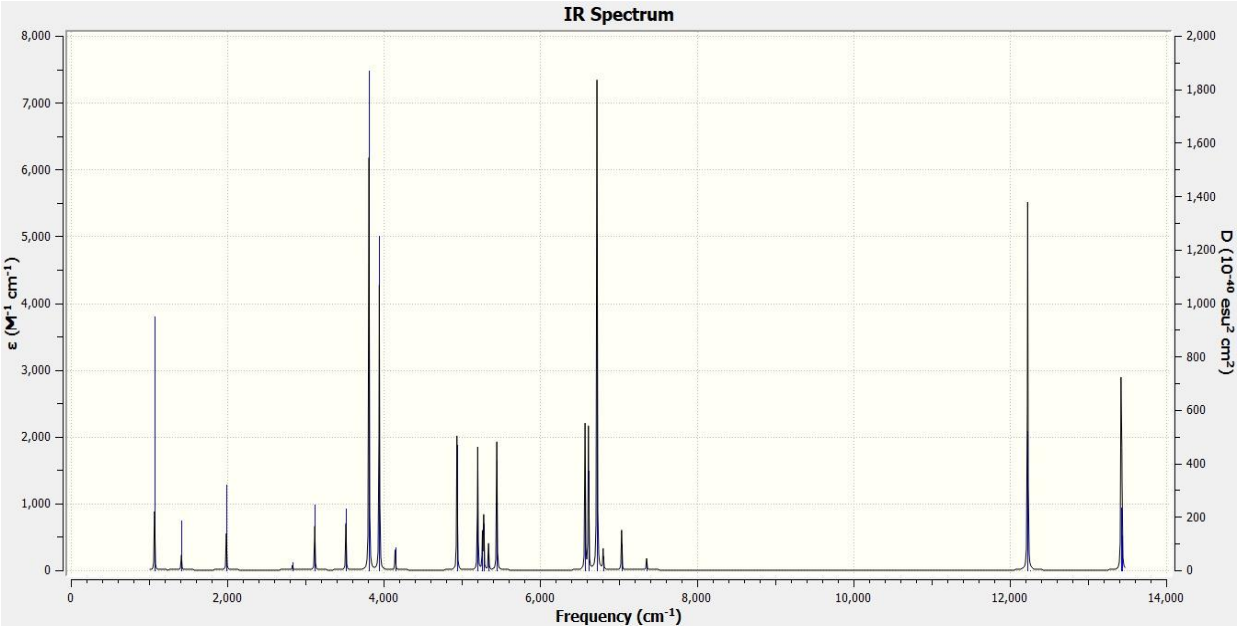
4 .السعة الحرارية:(CV)

- تم توفير قيم السعة الحرارية (CV) للموادّ المتفاعلة والناتج، ولكن تفسيرها يتطلب سياقًا إضافيًا أو مقارنة مع البيانات التجريبية.

بناءً على المعلومات الثرموديناميكية، فإن التفاعل هو عملية طاردة للحرارة بشكل كبير وتلقائية في الظروف المعطاة. تشير القيم السالبة الكبيرة لتغير الإنثالبي وطاقة جيبس الحرة إلى وجود قوة دافعة ثرموديناميكية قوية للتفاعل. ومع ذلك، فإن القيمة السالبة لتغير الأنتروبي تشير إلى أن تكوين ناتج الزنك-MOF ينتج عنه نظام أكثر ترتيبًا، وقد يكون ذلك بسبب الهيكل المنظم للهياكل العضوية المعدنية.

7. نتائج المطيافية تحت الحمراء:

نتائج المطيافية تحت الحمراء تُشير إلى الترددات والشدات الطيفية للعينات عند تعرضها لأشعة تحت الحمراء (الصورة أدناه). هذه النتائج تعكس التفاعل بين الأشعة الحمراء والجزيئات في العينة، وتُظهر التغييرات في الطاقة والتردد الذي يُمتص أو يُنتج عن التفاعل. تحليل نتائج المطيافية تحت الحمراء يمكن أن يوفر معلومات قيمة حول التركيب الجزيئي والترتيب الجزيئي للعينة[5].



الشكل III .3: طيف الأشعة تحت الحمراء لجزيئة Zn-MOF

عند تحليل النتائج، يُمكن أن تقدم البيانات المطيافية توجيهات حول:

1. **تحديد الروابط الكيميائية :**يمكن استخدام أطوال الروابط وترددات الاهتزاز لتحديد أنواع الروابط الكيميائية الموجودة في العينة.
2. **تحديد المجموعات الوظيفية :**يمكن تحديد مجموعات الوظائف الكيميائية الموجودة في العينة من خلال نمط الاهتزاز في الطيف.
3. **تحديد التركيب الجزيئي :**يمكن استخدام الأطوال الموجية والترددات الخاصة بكل نقطة اهتزاز لتحديد تركيب الجزيئات وترتيبها.
4. **التحليل الكمي :**يمكن استخدام الشدة الطيفية لتقدير تراكيز المركبات الموجودة في العينة.

بشكل عام، يمكن أن تُوفر مقارنة النتائج النظرية مع النتائج التجريبية رؤية شاملة حول جودة النموذج الحسابي المستخدم وتوافقه مع الظواهر الكيميائية الحقيقية.

8. خاتمة:

يركز هذا الفصل على الدراسة الحاسوبية لتخليق إطارات معدنية عضوية (MOFs) من Zn-EDTAواقتراح الظروف المثلى للتفاعل. تم استخدام حسابات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) وطرق شبه تجريبية مثل PM6 لدراسة مسار تخليق MOF من.Zn-EDTA .

يتضمن مسار التخليق إعداد ليجاندتاتEDTA ، تنسيق أيونات الزنك، تشكيل الإطار المعدني العضوي، وعملية التبلور. تم استكشاف الديناميكية الحرارية للتفاعل باستخدام حسابات الطاقة والمعلمات الثرموديناميكية مثل تغيرات الإنثالبي، وطاقة جيبس الحرة، والأنتروبي.

النتائج أظهرت أن تشكيل Zn-MOF من Zn-EDTA هو عملية طاردة للحرارة وتلقائية حيث كانت تغيرات الإنثالبي وطاقة جيبس الحرة سالبة. ومع ذلك، فإن تغير الأنتروبي السالب يشير إلى تكوين هيكل أكثر ترتيبًا في ناتجMOF .

تم أيضًا عرض نتائج المطيافية تحت الحمراء للعينات، والتي يمكن استخدامها لتحديد التركيب الجزيئي والمجموعات الوظيفية والروابط الكيميائية في ناتج.Zn-MOF .

بشكل عام، توفر هذه الدراسة الحاسوبية رؤى حول آلية تخليق Zn-MOFs وتقترح ظروفًا محسّنة للتفاعل بناءً على النمذجة النظرية.

مراجع الفصل الثالث

[1] Q. He and L. J. J. o. M. C. B. Zhang, "Design of carbon dots as nanozymes to mediate redox biological processes," vol. 11, no. 23, pp. 5071-5082, 2023.

[2] A. K. Kesharwani and R. Yadav, "A SHORT REVIEW ON SYNTHESIS AND APPLICATIONS OF ZINC BASED METAL ORGANIC FRAMEWORKS".

[3] Z. Bikadi and E. J. J. o. c. Hazai, "Application of the PM6 semi-empirical method to modeling proteins enhances docking accuracy of AutoDock," vol. 1, pp. 1-16, 2009.

[4] T. Krüger, M. Elstner, P. Schiffels, and T. J. T. J. o. c .p. Frauenheim, "Validation of the density-functional based tight-binding approximation method for the calculation of reaction energies and other data," vol. 122, no. 11, 2005.

[5] B. Andersson and P. J. F. s. j. Blomqvist, "Experimental study of thermal breakdown products from halogenated extinguishing agents," vol. 46, no. 3, pp. 104-115, 2011.

الخاتمة العامة

الخاتمة العامة

في ختام استكشافنا لميكانيكا الكم وتطبيقاتها في مجال محاكاة المواد، نجد أن هذا الفرع المهم من الفيزياء يمثل أساساً حيوياً لتفهمنا للعالم على المستوى الذري والجزيئي. تعتمد ميكانيكا الكم على مفاهيم فريدة مثل التفاوت الكمومي والتداخل الكمومي، مما يفتح أمامنا نوافذ جديدة لاستكشاف الظواهر الطبيعية.

تسهم ميكانيكا الكم في تفسير وتوقع الخصائص والسلوكيات على مستوى الذرات والجزيئات من خلال تقنيات الحساب الكمومي. يمكننا دراسة التفاعلات الكيميائية، والخصائص الإلكترونية للمواد، وتصميم مواد جديدة بطريقة دقيقة. ومع التقدم المستمر في تكنولوجيا المحاكاة الكمومية وقوة الحوسبة الكمومية، نتوقع أن يزيد تأثير ميكانيكا الكم في فهمنا وتصميمنا للمواد [1].

تعتبر ميكانيكا الكم في محاكاة المواد جزءًا أساسيًا من رحلتنا في استكشاف أسرار الطبيعة على المستوى الدقيق، وتعزز فهمنا للتفاعلات والظواهر التي تحدث في عالم الذرات والجزيئات. هذا الفهم المتقدم يمكن أن يؤدي إلى تطبيقات متعددة في مجالات العلوم والتكنولوجيا، بدءًا من الصناعة الكيميائية إلى تطوير الأدوية وتكنولوجيا المواد الكمومية[1].

في المستقبل، ستكون ميكانيكا الكم أداة لا غنى عنها لتحقيق تقدمات جديدة في مجالات متعددة، حيث تساعدنا في تحقيق رؤى جديدة وتحسين التكنولوجيا بشكل مستمر. إن استيعاب وفهم هذه المبادئ الأساسية يمكن أن يفتح أبوابًا جديدة للابتكار والتطوير في العديد من المجالات العلمية والصناعية، مما يسهم في تحسين نوعية الحياة ودفع حدود المعرفة الإنسانية.

نجد أن فهم واستخدام Gaussian 09W يمثل خطوة مهمة نحو تحقيق نتائج دقيقة في مجال الكيمياء الكمومية. يوفر البرنامج مجموعة واسعة من الأدوات والإمكانيات التي تساعد الباحثين والعلماء على تحليل البيانات الكيميائية المعقدة، وتحقيق تقدم كبير في الأبحاث المتعلقة بالمواد والتفاعلات الكيميائية.

يساهم البرنامج في توفير بيئة متكاملة لإجراء التجارب والمحاكاة، بدءًا من إنشاء ملفات الإدخال، مرورًا بعملية التنفيذ والتحليل، وصولًا إلى تفسير النتائج والتوصل إلى استنتاجات هامة. من خلال تحسين استخدام هذه الأدوات وفهم كيفية تطبيقها بشكل صحيح، يمكن للباحثين

تعزيز كفاءتهم ودقة أبحاثهم، مما يسهم في تطوير المعرفة العلمية ودفع حدود الابتكار في مجال الكيمياء.

بفضل التقدم التكنولوجي المستمر وتطوير البرمجيات المتقدمة مثلGaussian 09W ، يمكن للمجتمع العلمي الاستفادة من إمكانيات جديدة لإجراء الأبحاث والدراسات في مجال الكيمياء الكمومية، مما يفتح آفاقًا جديدة لفهم أعمق للظواهر الطبيعية وتطبيقاتها العملية في مختلف المجالات[2].

[1] B. Bauer, S. Bravyi, M. Motta, and G. K.-L. J. C. R. Chan, "Quantum algorithms for quantum chemistry and quantum materials science," vol. 120, no. 22, pp. 12685-12717, 2020.

[2] M. Saidj *et al.*, "Molecular structure, experimental and theoretical vibrational spectroscopy,(HOMO-LUMO, NBO) investigation,(RDG, AIM) analysis,(MEP, NLO) study and molecular docking of Ethyl-2-{[4-Ethyl-5-(Quinolin-8-yloxyMethyl)-4H-1, 2, 4-Triazol-3-yl] Sulfanyl} acetate," vol. 43, no. 3, pp. 2152-2176, 2023.