

الحسابات النظرية

Theoretical Calculation

تم في هذا الجزء من البحث إجراء حسابات نظرية باستخدام إحدى طرق ميكانيك الكم وهي طريقة (AM1) بواسطة برنامج الـ (Chem. office) الذي يُعد أحد البرامج الحديثة في كيمياء الحسابات النظرية، إذ يُعد من البرامج الكفوءة المستخدمة في الحسابات، حيث أصبح من الممكن إنجاز حسابات أصيلة ومهمة ذات علاقة بالأبعاد الهندسية للجزيئات باستخدام الحاسبات الشخصية نتيجة توفر البرامج المؤهلة للقيام بهذه المهمة، ويشتمل هذا البرنامج على كل أنواع ميكانيك الكم، والميكانيك الجزيئي، فطرق الميكانيك الجزيئي متضمنة في برنامج يطلق عليه (MM2) Molecular Mechanic، فيما تكون الطرائق شبه التجريبية لنظرية هيكل الموسعة، وطرائق (MINDO)، (MINDO-d) و (AMI) موجودة مباشرة ضمن برنامج^(١٢٢) (Chem. office).

إنَّ الشيء الذي يميز هذا البرنامج هو احتوائه على الكم الهائل من البرامج التي يمكن أن تؤدي مهمات مختلفة، إذ لا يمكن لأيٍّ من هذه البرامج المذكورة أن يُنجز كل الحسابات النظرية منفردة، وأنَّ كل طريقة قد تكون مفيدة في بعض التطبيقات في حين تعجز عن القسم الآخر، إنَّ برامج كيمياء النظرية المتوفرة قديماً كانت تكتب بحيث تتضمن إحدى الطرق المذكورة أعلاه، لذلك فإنها تعجز عن توفير المتطلبات الكبيرة للبحوث الحديثة.

إنَّ اختيار الطريقة الأفضل لإنجاز بحث معين يتطلب عدة عوامل منها: طبيعة الجزيئة المراد دراستها، ونوع البيانات المطلوبة، فضلاً عن توفر الإمكانيات العملية والحاسبات ذات المواصفات العالية بحيث يمكن إنجاز العمل بأقل وقت ممكن متجاوزاً بعض المحددات كحجم الجزيئة وعدد ذراتها.

ومن المعلومات التي يمكن الحصول عليها باستخدام طرق ميكانيك الجزيئي^(١٢٣) المتضمنة برنامج (MM2) هي: -

١. إنجاز عملية تخفيض الطاقة للحصول على الهيئة الأكثر استقراراً (الأقل طاقة).
٢. إجراء حسابات الطاقة للمقارنة بين هيتين للجزيئة نفسها.
٣. الهيئات الفراغية التي تشغلها الجزيئات عن طريق تعيين الزاوية المحصورة بين مستويي الزاوية الزوجية (Dihedral Angle).

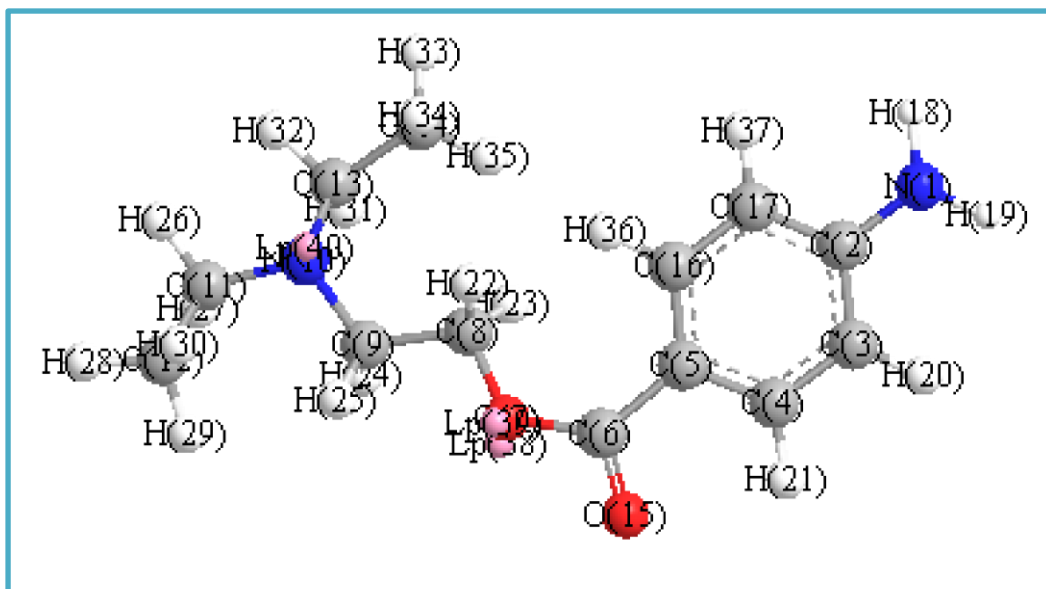
٤. دراسة الحركة الجزيئية باستخدام الديناميك الجزيئي.

أمّا المعلومات التي يمكن الحصول عليها من طرائق ميكانيك الكم^(١٢٤) وباستخدام برنامج (Chem. office) فهي عديدة، ومنها: -

١. طاقة الاوربيتالات الجزيئية (HOMO-LUMO).
٢. حرارة التكوين (Heat of formation) لتقييم طاقة استقراره هيئات الجزيئات المختلفة.
٣. الشحنات الذرية الجزيئية المحسوبة من معاملات الاوربيتالات الجزيئية.
٤. الجهد أو الطاقة الالكتروستاتية.
٥. عزم ثنائي القطب.
٦. هيئات الحالات الانتقالية وطاقتها.
٧. طاقة تفكك الأصرة.

وقد تم انجاز الحسابات النظرية بطريقة (AM1)، وحسب الخطوات الآتية:

١. رُسمت الصيغ الجزيئية للمركبات باستخدام برنامج (Chem.2D)
٢. حُوّلت الصيغ الجزيئية المرسومة في (١) إلى برنامج (Chem.3D)
٣. أُجريت عملية تخفيض الطاقة باستخدام برنامج (MM2) للحصول على أفضل استقراره للمركبات المدروسة وبأقل طاقة ممكنة.
٤. تم إجراء الحسابات حسب الطريقة (AM1) من خلال إيعاز Calculation وإيعاز Games Interface، ومن خلال Job and Theory اختيرت الطريقة AM1 لحساب قيم الزوايا، وأطوال الأواصر، وقيم الشحنة الالكترونية وطاقة الإعاقة الفراغية ومن خلال إيعازات الـ Molecular Orbital حسبت قيم طاقات الاوربيتالات الـ HOMO والـ LUMO.
٥. تؤخذ بعض المتغيرات ذات العلاقة بالثوابت المراد دراستها منها (الشحنة، وطول الأصرة، والزاوية، وطاقة الإعاقة الفراغية وأعلى مستوى طاقي مشغول (HOMO)، وأوطأ مستوى طاقي فارغ (LUMO) من نتائج البرنامج.



الشكل (١-٤) التركيب الفراغي لمركب البروكاين

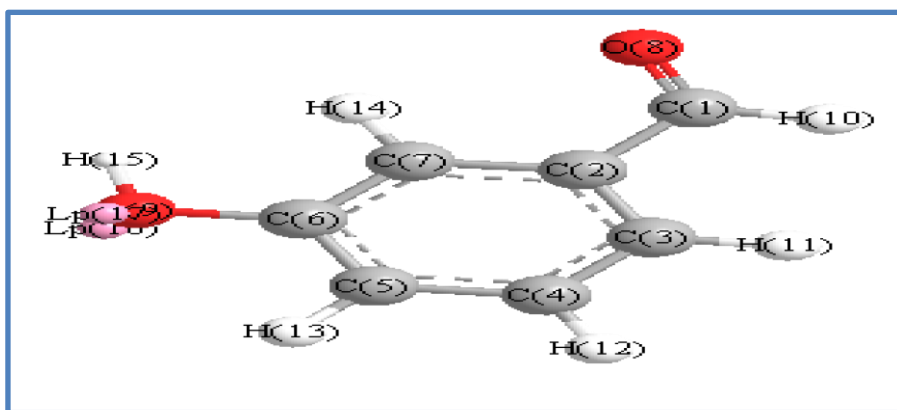
جدول (١-٤) قيم أطوال الاواصر والزوايا والشحنات المحسوبة نظريا بطريقة AM1 لمركب البروكاين

BOND LENGTH \AA°		BOND ANGLE Degry		CHARGE _c	
N(10)-Lp(40)	٠.٦٠١٥	H(37)-C(17)-C(16)	١١٩.٨٦١٢	N(1)	-0.3396
O(7)-Lp(39)	٠.٥٩٩٨	H(37)-C(17)-C(2)	١١٩.٧٦٧٧	C(2)	0.1025
O(7)-Lp(38)	٠.٥٩٩٨	C(16)-C(17)-C(2)	١٢٠.٣٥٨٧	C(3)	-0.2099
C(17)-H(37)	١.١٠٢٤	H(36)-C(16)-C(17)	١١٥.٨٠٣٦	C(4)	-0.0298
C(16)-H(36)	١.٠٩٥٥	H(36)-C(16)-C(5)	١٢٢.٧١٥٥	C(5)	-0.1940
C(14)-H(35)	١.١٠٩٨	C(17)-C(16)-C(5)	١٢١.٤٣٦٣	C(6)	0.3511
C(14)-H(34)	١.١١٤٠	H(35)-C(14)-H(34)	١٠٨.٨١٣١	O(7)	-0.2577
C(14)-H(33)	١.١١٤٩	H(35)-C(14)-H(33)	١٠٤.٩٨٧٧	C(8)	-0.0216
C(13)-H(32)	١.١١٨٦	H(35)-C(14)-C(13)	١١٣.٤٠٢٩	C(9)	-0.0686
C(13)-H(31)	١.١١٥٣	H(34)-C(14)-H(33)	١٠٧.٠٨٠٦	N(10)	-0.2788
C(12)-H(30)	١.١١٣١	H(34)-C(14)-C(13)	١١١.٢٩٧٥	C(11)	-0.0518
C(12)-H(29)	١.١١٤٣	H(33)-C(14)-C(13)	١١٠.٨٨٨٠	C(12)	-0.2164
C(12)-H(28)	١.١١٤٧	H(32)-C(13)-H(31)	١٠٥.٩٠٣٧	C(13)	-0.0629
C(11)-H(27)	١.١١٨٥	H(32)-C(13)-C(14)	١٠٤.٠٢٨٩	C(14)	-0.2152
C(11)-H(26)	١.١١٦٥	H(32)-C(13)-N(10)	١٠٩.١١٩٦	O(15)	-0.3147
C(9)-H(25)	١.١١٥٩	H(31)-C(13)-C(14)	١١٠.٥٠٧٨	C(16)	-0.0518
C(9)-H(24)	١.١١٦١	H(31)-C(13)-N(10)	١١١.١٦٧١	C(17)	-0.2145
C(8)-H(23)	١.١١٢٩	C(14)-C(13)-N(10)	١١٥.٤٣٦٩	H(18)	0.1989

				H(19)	0.2010
				H(20)	0.1397
				H(21)	0.1543
				H(22)	0.0943
				H(23)	0.0830
				H(24)	0.0594
				H(25)	0.1199
				H(26)	0.0480
				H(27)	0.0852
				H(28)	0.0764
				H(29)	0.0920
				H(30)	0.0758
				H(31)	0.0588
				H(32)	0.0818
				H(33)	0.0742
				H(34)	0.0895
				H(35)	0.0653
				H(36)	0.1389
				H(37)	0.1370

جدول (٢-٤) قيم المتغيرات الطاقية المحسوبة بطريقة AM1 لمركب البروكاين

Stretch	Bend	Stretch-Bend	Torsion	Non-1,4 VDW	1,4 VDW	Dipole/dipole	Total Kcal/mol
1.8635	9.0611	٠.٥٨٤٦	-1.5369	0.6790	12.2581	4.4908	27.4002
HOMO (e.v)	LUMO (e.v)	ΔE LUMO -HOMO		Total Energy Kcal/mol	Heat of information Kcal/mol		
-0.3189	0.0017	0.3206		1	-59.1784		



الشكل (٢-٤) التركيب الفراغي لمركب ميتا-هيدروكسي بنزالديهايد

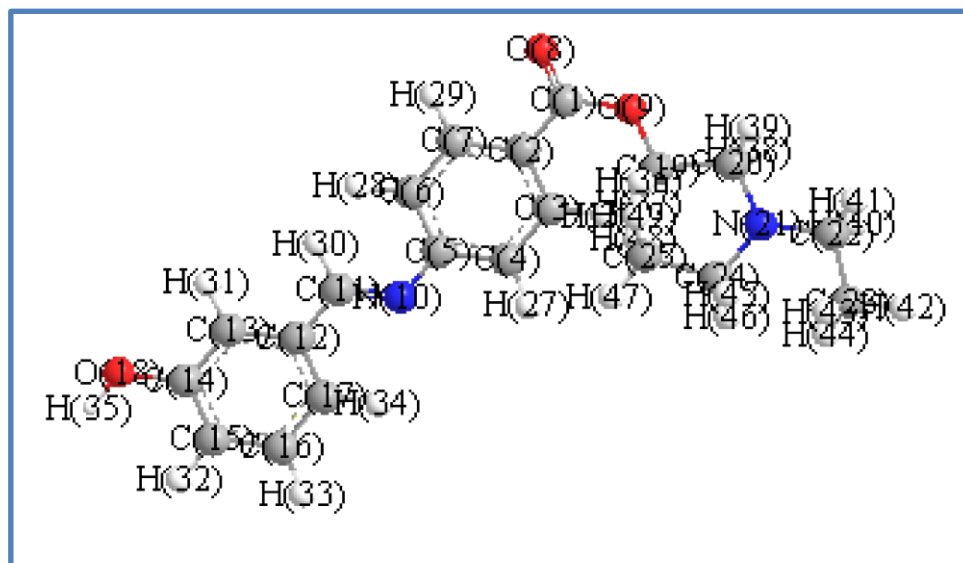
جدول (٣-٤) قيم أطوال الاواصر والزوايا والشحنات المحسوبة نظريا بطريقة AM1 لمركب

ميثا-هيدروكسي بنزالديهايد

BOND LENGTHH		BOND ANGLE		CHARGE	
O(9)-Lp(17)	٠.٦٠٠٥	Lp(17)-O(9)-Lp(16)	١١٣.٢٦٤٢	C(1)	0.2224
O(9)-Lp(16)	٠.٦٠٠٥	Lp(17)-O(9)-H(15)	١٠٤.٤٤١٠	C(2)	-0.1435
O(9)-H(15)	٠.٩٧١٠	Lp(17)-O(9)-C(4)	١١٢.٣٩٥٩	C(3)	-0.1160
C(7)-H(14)	١.١٠١٨	Lp(16)-O(9)-H(15)	١٠٤.٤٨٤٨	C(4)	0.0646
C(6)-H(13)	١.١٠٢٣	Lp(16)-O(9)-C(4)	١١٢.٤٤٨١	C(5)	-0.1834
C(5)-H(12)	١.١٠٢٠	H(15)-O(9)-C(4)	١٠٩.٠٨٧٤	C(6)	-0.1059
C(3)-H(11)	١.١٠٢٣	H(14)-C(7)-C(6)	١١٩.٣٨٢٩	C(7)	-0.1063
C(1)-H(10)	١.١١٢١	H(14)-C(7)-C(2)	١٢١.١٥٧٤	O(8)	-0.2848
C(4)-O(9)	١.٣٥٩٢	C(6)-C(7)-C(2)	١١٩.٤٥٩٧	O(9)	-0.2500
C(1)-O(8)	١.٢٢٣٠	H(13)-C(6)-C(7)	١١٩.٨٧٣٣	H(10)	0.0949
C(2)-C(7)	١.٤٠٠٤	H(13)-C(6)-C(5)	١١٩.٩٧٢٥	H(11)	0.1534
C(6)-C(7)	١.٣٩٦٦	C(7)-C(6)-C(5)	١٢٠.١٥٤٢	H(12)	0.1372
C(5)-C(6)	١.٣٩٥١	H(12)-C(5)-C(6)	١١٩.٣٥٩١	H(13)	0.1404
C(4)-C(5)	١.٤٠٠٩	H(12)-C(5)-C(4)	١١٩.٣٣٩٥	H(14)	0.1569
C(3)-C(4)	١.٣٩٧٢	C(6)-C(5)-C(4)	١٢١.٣٠١٤	H(15)	0.2202

جدول (٤-٤) قيم المتغيرات الطاقية المحسوبة بطريقة AM1 لمركب ميتا-هيدروكسي بنزالديهايد

Stretch	Bend	Stretch-Bend	Torsion	Non-1,4 VDW	1,4 VDW	Dipole/dipole	Total Kcal/mol
0.1343	1.2043	0.0011	-3.9187	-0.6682	2.7600	-0.0871	-0.5743
HOMO (e.v)	LUMO (e.v)	$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$		Total Energy Kcal/mol		Heat of information Kcal/mol	
-٠.٣٤٦٨	-0.0201	0.3258		-37338.312		-52.5286	



الشكل (٤-٣) التركيب الفراغي لقاعدة شف

جدول (٤-٥) قيم أطوال الاواصر والزوايا والشحنات المحسوبة نظريا بطريقة AM1 لمركب

2-(diethyl amino) ethyl 4-[(3-hydroxybenzylidene) amino] benzoate

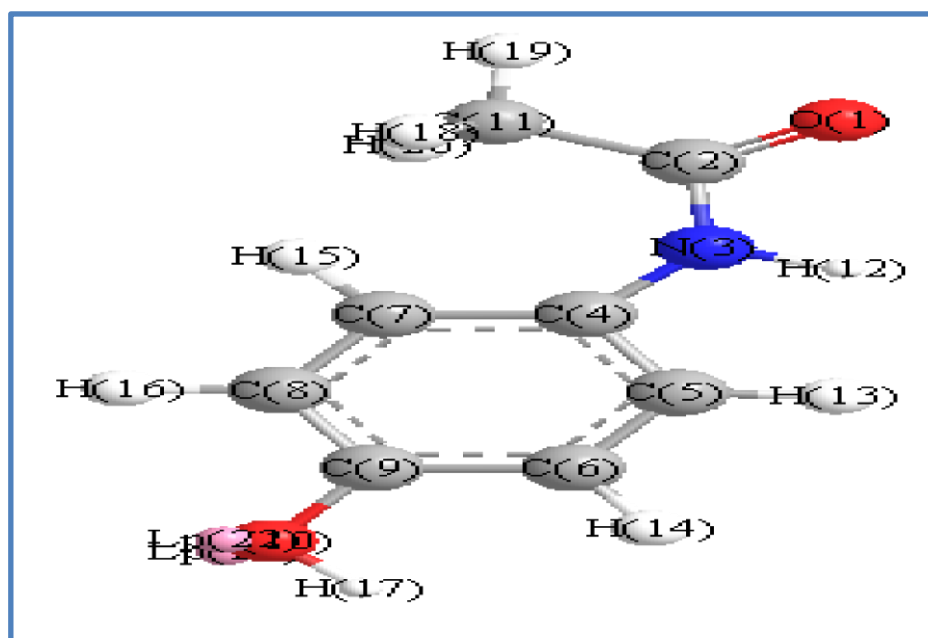
BOND LEGTH		BOND ANGLE		CHARGE	
O(24)-Lp(52)	٠.٦٠٠٥	Lp(52)-O(24)-Lp(51)	١١٣.٤٦٨٦	C(1)	0.0204
O(24)-Lp(51)	٠.٦٠٠٤	Lp(52)-O(24)-H(46)	١٠٤.٦٨٠	C(2)	-0.1367
N(16)-Lp(50)	٠.٦٠٠٦	Lp(52)-O(24)-C(20)	١١٢.٦٦١٤	C(3)	-0.0644
N(9)-Lp(49)	٠.٦٠١٢	Lp(51)-O(24)-H(46)	١٠٤.٢٨٢٢	C(4)	-0.1544
O(6)-Lp(48)	٠.٥٩٩٢	Lp(51)-O(24)-C(20)	١١٢.٦١٦٨	C(5)	0.3462
O(6)-Lp(47)	٠.٥٩٨٦	H(46)-O(24)-C(20)	١٠٨.٧١٨٩	O(6)	-0.2569

O(24)-H(46)	٠.٩٧٠٨	H(45)-C(23)-C(22)	١٢٠.٣٣٠٧	C(7)	-0.0201
C(23)-H(45)	١.١٠١٣	H(45)-C(23)-C(19)	١٢٠.١٩٣٧	C(8)	-0.0691
C(22)-H(44)	١.١٠١٤	C(22)-C(23)-C(19)	١١٨.٣٨١٨	N(9)	-0.2781
C(21)-H(43)	١.١٠١٧	H(44)-C(22)-C(23)	١١٩.٩٩٠٢	C(10)	-0.1109
C(19)-H(42)	١.١٠١٥	H(44)-C(22)-C(18)	١٢٠.٤٩٥٨	C(11)	-0.0630
C(17)-H(41)	١.١٠٢٣	C(23)-C(22)-C(18)	١١٨.٧٦٣٣	C(12)	-0.2121
C(15)-H(40)	١.١٠١٢	H(43)-C(21)-C(20)	١١٩.٢٨٥٧	O(13)	-0.3031
C(14)-H(39)	١.١٠٠٨	C(20)-C(21)-C(18)	١٢٠.١١٦٧	C(14)	-0.0805
C(12)-H(38)	١.١١٤٣	O(24)-C(20)-C(21)	١٢١.٣٤٠٢	C(15)	-0.1669
C(12)-H(37)	١.١١٣٧	O(24)-C(20)-C(19)	١٢٢.٠٥٠٧	N(16)	-0.1463
C(12)-H(36)	١.١١٤٧	C(21)-C(20)-C(19)	١١٦.٤٩٠٥	C(17)	0.0055
C(11)-H(35)	١.١١٥٧	H(42)-C(19)-C(23)	١٢٠.٠٠٤٢	C(18)	-0.0360
C(11)-H(34)	١.١١٦٢	H(42)-C(19)-C(20)	١١٩.٩٨٠٩	C(19)	-0.1425
C(10)-H(33)	١.١١٤٧	C(23)-C(19)-C(20)	١١٩.٠٩٠٦	C(20)	0.0724
C(10)-H(32)	١.١١٤٤	C(22)-C(18)-C(21)	١١٨.٨٦٤٣	C(21)	-0.1816
C(10)-H(31)	١.١١٣٢	C(22)-C(18)-C(17)	١٢٠.٢٥٣٤	C(22)	-0.1384

جدول (٤-٦) قيم المتغيرات الطاقية المحسوبة بطريقة AM1 لمركب

2-(diethyl amino) ethyl 4-[(3-hydroxybenzylidene) amino] benzoate

Stretch	Bend	Stretch-Bend	Torsion	Non-1,4 VDW	1,4 VDW	Dipole/Dipole	Total Kcal/mol
1.2105	4.1220	0.2472	0.0000	-5.8935	14.3788	4.0753	18.1403
HOMO (e.v)		LUMO (e.v)	$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$		Total Energy Kcal/mol		Heat of information Kcal/mol
-0.3414		-0.0255	0.3159		1		-40.2343



الشكل (٤-٤) التركيب الفراغي لمركب باراسيتامول

جدول (٤-٧) قيم أطوال الاواصر والزوايا والشحنات المحسوبة نظريا بطريقة AM1 لمركب

الباراسيتامول

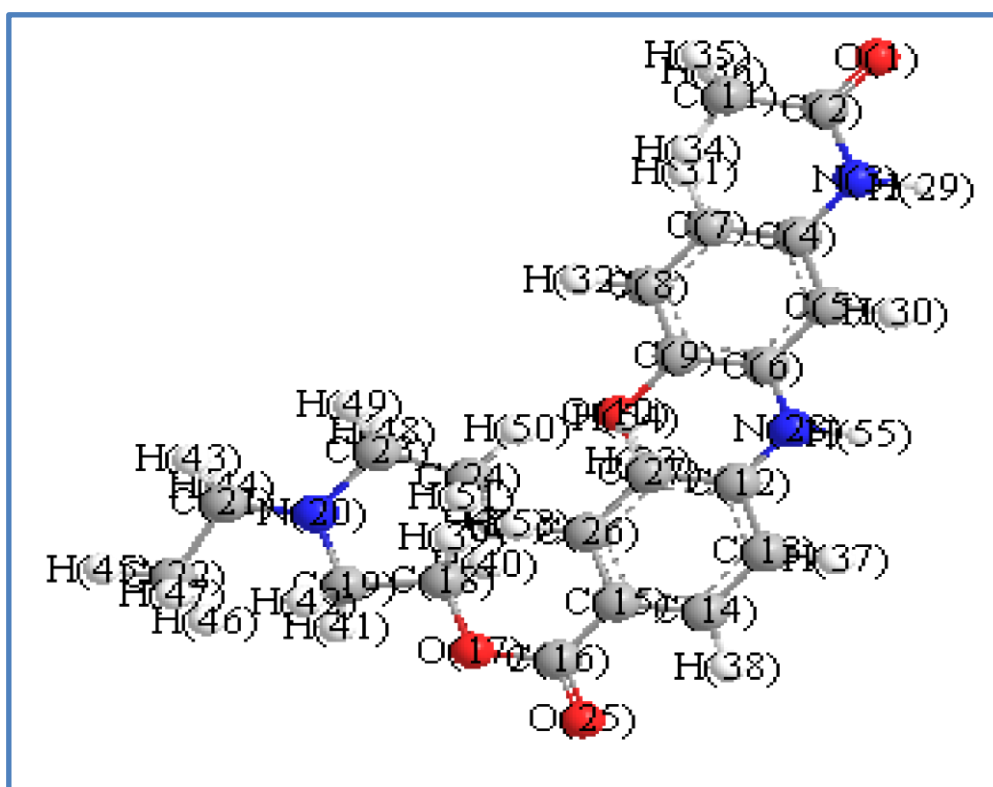
BOND LENGTH		BOND ANGLE		CHARGE	
C(7)-H(15)	1.0960	Lp(22)-O(10)-H(17)	104.3101	O(1)	-0.3654
C(6)-H(14)	1.1044	Lp(22)-O(10)-C(9)	112.4040	C(2)	0.3067
C(5)-H(13)	1.1034	Lp(21)-O(10)-H(17)	104.3996	N(3)	-0.3264
N(3)-H(12)	1.0104	Lp(21)-O(10)-C(9)	112.3978	C(4)	0.0600

C(2)-C(11)	١.٥١٥١	H(17)-O(10)-C(9)	١٠٩.١٠٣٦	C(5)	-0.1461
C(9)-O(10)	١.٣٥٨٩	O(10)-C(9)-C(8)	١٢١.٧٣١٠	C(6)	-0.1749
C(6)-C(9)	١.٣٩٦٦	O(10)-C(9)-C(6)	١٢١.٠٨٤٠	C(7)	-0.1506
C(8)-C(9)	١.٣٩٧٤	C(8)-C(9)-C(6)	١١٧.١٨٤٩	C(8)	-0.1242
C(7)-C(8)	١.٣٩٧١	H(16)-C(8)-C(9)	١١٨.٨٤٩٢	C(9)	0.0485
C(4)-C(7)	١.٣٩٨٣	H(16)-C(8)-C(7)	١١٩.٣٨٠٩	O(10)	-0.2489
C(5)-C(6)	١.٣٩٥٦	C(9)-C(8)-C(7)	١٢١.٧٦٩٩	C(11)	-0.2325
C(4)-C(5)	١.٤٠١٥	H(15)-C(7)-C(8)	١١٦.٥١٠٦	H(12)	0.2366
N(3)-C(4)	١.٣٤٨٩	H(15)-C(7)-C(4)	١٢٢.٣٨٥٢	H(13)	0.1373
C(2)-N(3)	١.٣٦٢٩	C(8)-C(7)-C(4)	١٢١.١٠٢٦	H(14)	0.1372
O(1)-C(2)	١.٢٠٦٩	H(14)-C(6)-C(9)	١١٩.٢٨٣٢	H(15)	0.1392

جدول (٨-٤) قيم المتغيرات الطاقية المحسوبة بطريقة AM1 لمركب

الباراسيتامول

Stretch	Bend	Stretch-Bend	Torsion	Non-1,4 VDW	1,4 VDW	Dipole / Dipole	Total Kcal/mol
0.1741	6.7985	-0.0134	-5.2199	-0.2110	-0.8525	-4.8283	-4.1526
HOMO (e.v)	LUMO (e.v)	$\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$		Total Energy Kcal/mol		Heat of information Kcal/mol	
-0.3147	٠.٠٠٤٢	0.3189		-46024.758		-56.7441	



الشكل (٥-٤) التركيب الفراغي لمركب (البروكائين – باراسيتامول)

جدول (٩-٤) قيم أطوال الاواصر والزوايا والشحنات المحسوبة نظريا بطريقة AM1 لمركب

البروكائين – باراسيتامول

BOND LENGTH		BOND ANGLE		CHARGE	
N(26)-H(55)	1.0040	C(24)-C(27)-O(28)	120.5942	C(1)	0.0642
O(25)-H(54)	0.9693	C(24)-C(27)-N(26)	124.1006	C(2)	-0.1776
C(24)-H(53)	1.1170	O(28)-C(27)-N(26)	115.3029	C(3)	-0.0507
C(24)-H(52)	1.1162	H(55)-N(26)-C(27)	113.7084	C(4)	-0.1699
C(24)-H(51)	1.1210	H(55)-N(26)-C(21)	114.5393	C(5)	0.3475
C(22)-H(50)	1.0986	C(27)-N(26)-C(21)	131.5411	O(6)	-0.2561

C(20)-H(49)	1.1018	H(54)-O(25)- C(23)	108.9192	C(7)	-0.0244
C(19)-H(48)	1.1013	H(53)-C(24)- H(52)	109.7436	C(8)	-0.0671
N(17)-H(47)	0.9997	H(53)-C(24)- H(51)	108.5688	N(9)	-0.2790
C(16)-H(46)	1.1017	H(53)-C(24)- C(27)	110.3839	C(10)	-0.0526
C(15)-H(45)	1.1018	H(52)-C(24)- H(51)	108.7037	C(11)	-0.2167
C(13)-H(44)	1.1156	H(52)-C(24)- C(27)	111.1659	C(12)	-0.0625
C(13)-H(43)	1.1171	H(51)-C(24)- C(27)	108.2071	C(13)	-0.2166
C(13)-H(42)	1.1164	O(25)-C(23)- C(18)	124.6307	O(14)	-0.2975
C(12)-H(41)	1.1304	O(25)-C(23)- C(22)	113.8093	C(15)	-0.0669
C(12)-H(40)	1.1292	C(18)-C(23)- C(22)	121.5294	C(16)	-0.1910
C(11)-H(39)	1.1157	H(50)-C(22)- C(23)	116.2465	N(17)	-0.2536
C(11)-H(38)	1.1164	H(50)-C(22)- C(21)	122.7978	C(18)	-0.0602
C(11)-H(37)	1.1174	C(23)-C(22)- C(21)	120.9555	C(19)	-0.1017
C(10)-H(36)	1.1295	N(26)-C(21)- C(22)	124.2974	C(20)	-0.1924
C(10)-H(35)	1.1292	N(26)-C(21)- C(20)	118.2138	C(21)	0.1111
C(8)-H(34)	1.1271	C(22)-C(21)- C(20)	117.4831	C(22)	-0.2025
C(8)-H(33)	1.1293	H(49)-C(20)- C(21)	120.0359	C(23)	0.0984
C(7)-H(32)	1.1190	H(49)-C(20)- C(19)	118.8064	C(24)	-0.2334
C(7)-H(31)	1.1229	C(21)-C(20)- C(19)	121.1524	O(25)	-0.2581
C(3)-H(30)	1.1035	H(48)-C(19)- C(20)	118.4475	N(26)	-0.3268

C(2)-H(29)	1.1008	H(48)-C(19)- C(18)	119.6311	C(27)	0.3084
C(27)-C(24)	1.5005	C(20)-C(19)- C(18)	121.9034	O(28)	-0.3561
C(27)-O(28)	1.2478	C(23)-C(18)- C(19)	116.7428	H(29)	0.1454
N(26)-C(27)	1.3929	C(23)-C(18)- N(17)	122.3423	H(30)	0.1556
C(21)-N(26)	1.3963	C(19)-C(18)- N(17)	120.4786	H(31)	0.0962
C(23)-O(25)	1.3767	H(47)-N(17)- C(18)	113.9861	H(32)	0.0822
C(18)-C(23)	1.4164	H(47)-N(17)- C(1)	114.1619	H(33)	0.0598
C(23)-C(22)	1.4016	C(18)-N(17)- C(1)	122.3221	H(34)	0.1170
C(21)-C(22)	1.4029	H(46)-C(16)- C(1)	119.9947	H(35)	0.0482
C(20)-C(21)	1.4220	H(46)-C(16)- C(15)	119.5868	H(36)	0.0868
C(19)-C(20)	1.3824	C(1)-C(16)-C(15)	120.3937	H(37)	0.0767
C(18)-C(19)	1.4129	H(45)-C(15)- C(16)	118.9500	H(38)	0.0909
N(17)-C(18)	1.4112	H(45)-C(15)- C(4)	120.4158	H(39)	0.0760
C(1)-N(17)	1.4042	C(16)-C(15)-C(4)	120.6334	H(40)	0.0822
C(1)-C(16)	1.4120	H(44)-C(13)- H(43)	108.4629	H(41)	0.0579
C(15)-C(16)	1.3887	H(44)-C(13)- H(42)	107.9000	H(42)	0.0746
C(4)-C(15)	1.3973	H(44)-C(13)- C(12)	112.0686	H(43)	0.0698
C(5)-O(14)	1.2327	H(43)-C(13)- H(42)	108.2627	H(44)	0.0895
C(12)-C(13)	1.5249	H(43)-C(13)- C(12)	110.5715	H(45)	0.1472
N(9)-C(12)	1.4588	H(42)-C(13)- C(12)	109.4640	H(46)	0.1562

C(10)-C(11)	1.5189	H(41)-C(12)- H(40)	106.5827	H(47)	0.2206
N(9)-C(10)	1.4582	H(41)-C(12)- C(13)	108.2461	H(48)	0.1371
C(8)-N(9)	1.4510	H(41)-C(12)- N(9)	111.2437	H(49)	0.1411
C(7)-C(8)	1.5367	H(40)-C(12)- C(13)	107.9224	H(50)	0.1581
O(6)-C(7)	1.4316	H(40)-C(12)- N(9)	109.1570	H(51)	0.1207
C(5)-O(6)	1.3754	C(13)-C(12)- N(9)	113.4140	H(52)	0.1109
C(4)-C(5)	1.4730	H(39)-C(11)- H(38)	108.5849	H(53)	0.1092
C(3)-C(4)	1.4011	H(39)-C(11)- H(37)	108.3350	H(54)	0.2341
C(2)-C(3)	1.3879	H(39)-C(11)- C(10)	111.2729	H(55)	0.2401

جدول (١٠-٤) قيم المتغيرات الطاقية المحسوبة بطريقة AM1 لمركب

البروكاتين – باراسيتامول

Stretch	Bend	Stretch- Bend	Torsion	Non-1,4 VDW	1,4 VDW	Dipole/ dipole	Total Kcal/mol
2.2625	14.4359	0.5897	5.3347	-3.1002	11.6213	-0.4337	30.7102
HOMO (e.v)	LUMO (e.v)	$\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$		Total Energy Kcal/mol		Heat of information Kcal/mol	
-0.3065	-0.0220	0.2845		1		-98.7101	

كما لوحظ من خلال الجداول السابقة تركز الكثافات الإلكترونية على الذرات ذات السالبية الكهربائية العالية في الذرة (O₈) (-0.284) الجدول (٣-٤) ونقصانها على الذرات المرتبطة بالذرات ذات السالبية الكهربائية العالية مثل (C₁) (0.2224) أما قيم أطوال الاواصر فنلاحظ من خلال النتائج أنها تأثرت بشكل كبير بموقع المجاميع المعوضة على الحلقة التي تعمل على

نقصان قيمة الأصرة كما في الأصرة (C_6-C_7) (1.396) مقارنة مع الأصرة (C_7-C_2) (1.400) وهذا بسبب نقصان الكثافة الالكترونية وبالتالي طول الأصرة. وبالنسبة للزاوية فكان التغير بقيمتها محسوسا بسبب ضعف تأثير المجاميع المعوضة عليها لصغر حجمها. وهذا الكلام ينطبق على بقية الذرات العائدة للمركبات قيد الدراسة. ويبين الجدول (٤-١١) خلاصة لقيم الطاقات المحسوبة للمركبات قيد الدراسة. كما نلاحظ من خلال قيم الطاقات الكلية (Total) ارتفاعها للمركبات ذات الهياكل الفراغية الأكثر تعقيدا كما في مركب البروكائين (٢٧.٤٠٠٢) كيلو كلاري/مول ولمركب (البروكائين-باراسيتامول) (٣٠.٧١٠) كيلو كلاري/مول وانخفاضها لبقية المركبات الأقل تعقيدا في التركيب الفراغي كما في الباراسيتامول (٠.٥٧٤٣-) كيلو كلاري/مول وكذلك الميتا-هيدروكسي بنزالديهايد (٤.١٥٢٦-) كيلو كلاري/مول حيث ان هذه القيمة تمثل مجموع الطاقات الكلية (و التي بمجملها تمثل الاستقرارية الكلية للمركبات. ما بقية القيم الأخرى فكانت على نفس النمط من التأثير.

جدول (٤-١١) نتائج المتغيرات الطاقية المحسوبة نظرياً للمركبات المدروسة

Com.	HOMO	LUMO	$\Delta E(E_{LU}-E_{HO})$	ΔH_f	S.E
PRO	-0.3189	٠.٠٠١٧	٠.٣٢٠٦	-59.178	٢٧.٤٠٠٢
m-BEN	-0.3147	0.0042	٠.٣١٨٩	-56.744	-4.1526
(PRO-PARA)	-0.3065	٠.٠٢٢٠	٠.٣٢٨٥	-98.71	30.710
PARA	-0.3468	٠.٠٢٠١	٠.٣٢٦٧	-52.52	-0.5743
Sch-PRO	-0.3414	٠.٠٢٥٥	٠.٣١٥٩	-40.23	١٨.٤٠٣

نلاحظ من خلال الجدول اعلاه أنَّ لمركب هيدروكلوريد البروكائين القدرة العالية على تكوين مركبات مستقرة مع كل من الميتا -هيدروكسي بنزالديهايد والباراسيتامول وأنَّ قدرته على تكوين او تفاعله مع الباراسيتامول اكثر من خلال قيم طاقة حرارة التكوين التي بلغت 98.71- وهذا يدل على مدى الاستقرارية العالية لهذا المركب مقارنة مع المركب الاخر وكذلك تم تأكيد النتائج من خلال قيم الفرق في الطاقة (ΔE) بين المستويات الطاقية حيث كلما كانت قيم ΔE قليلة دلت على استقرارية المركب المتكون وهذا يتفق مع النتائج التي تم الحصول عليها في الجدول اعلاه . حيث كانت قيم ΔE للمركب PRO-PARA اقل ما يمكن (0.2845) والتي تتفق مع قيم ΔH_f العالية للمركب نفسه.