

**عنوان طرح:** خواص تقارنی تعدادی از گرافهای شیمیایی

**مجری طرح:** قربانعلی مغانی

**مدت اجرا:** ۱۲ ماه

**چکیده:**

کامپیوتر راهکاری جهت شناسایی و مطالعه علمی تر در مسائل پیشروی صنایع می باشد. با محاسبات دقیق و پیشرفته که به کمک ریاضیات و با استفاده از کامپیوتر های پیشرفته حاصل گشته می توان به مسائل زیادی در علوم جدید که تا کنون لاینحل بوده اند، پاسخ داد. در طرح فوق گروه های تقارنی مولکول تترا آمین پلاتینیوم ۲ با گروه های نقطه ای  $C_{2v}$  و  $C_{4v}$  مورد بررسی قرار گرفته اند. این مسائل از مسائل روز شیمی و پیشبرد علوم نظری چون ریاضیات و مورد علاقه شیمی دانهاست. کاهای صورت گرفته موارد استفاده زیادی در تولید اسپین هسته ای، طیف NMR، اسپکتروسکوپی مولکولی و محاسبه ایزومرهای شیمیایی دارند. همچنین کاربرد های زیادی در مطالعه فولرن ها دیده شده است.