کاربرد برنامه NBO5.0 (اربیتال پیوندی طبیعی) در شیمی دبیرستان و پیش دانشگاهی

محمد کریمی
کاشمر- خیابان امام خمینی - میدان ازادی- دبیرستان امام خمینی
Mkarimib167@yahoo.com

چکیده

تجزیه و تحلیل NBO اطلاعاتی مانند بار قراردادی روی اتمها، نوع پیوند، هیبریداسیون، مقادیر رزونانسی، درجهٔ پیوند و ... نشان می دهد ازطرفی می‌توان با توجه به عدد اشغال، درجهٔ پیوند را در یک ترکیب به دست آورد .تجزیه و تحلیل NBO نوع اربیتالهای هیبریدی شرکت کننده در پیوند و سهم هر اربیتال را در هیبرید مشخص می‌کند.در این مقاله دو ترکیب متیل امین و نیتروزیل متان مورد بررسی قرارگرفته است. بار قرار دادی روی اتمها در متیل امین مشخص شده است بار قرار دادی نیترون 0/0897- ودر کربن 0/0441- محاسبه شده است.ساختار لوویس نیتروزیل متان رسم شده است.نوع پیوند و سهم هر اربیتال پیوندی در هیبرید مشخص شده است .مقادیر شیفت شیمیایی اتمها برای متیل امین محاسبه شده است.انرژیهای اندرکنش اربیتالهای دهنده وپذیرنده در نیتروزیل متان محاسبه شده است. برای نیتروزیل متان دو ساختار رزونانسی ، که درصد انها از بقیه بیشتر است رسم شده است.

واژگان کلیدی: NBO (اربیتال پیوندی طبیعی)، نیتروزیل متان(CH_3NO)، متیل امین(CH_3NH_2)،عدد اشغال،اربیتال لوویس

مقدمه

در نظریه NBO، از توابع موج الکترونی که بر پایهٔ اربیتالهای لوویس اشغال شده و غیرلوویس استوار است، استفاده می گردد .یکی از نظریه های بسیار جدیدی که با استفاده از آن می‌توان اطلاعاتی راجع به انرژی و قدرت پیوند هیدروژنی به دست آورد و ترکیبات را مورد مقایسه قرار داد، نظریه اربیتال پیوندی طبیعی NBOاست [1]. در این روشها، به عنوان مثال می‌توان با استفاده از نظریه اختلال مرتبه دو انرژی اندرکنش $\sigma^*_{(O-H)}$ و زوج الکترون ناپیوندی اکسیژن (no)را تخمین زد و قدرت پیوند هیدروژنی را مورد ارزیابی قرار داد. .با استفاده از عدد اشغال اربیتالهای پیوندی π و σ می‌توان عدم استقرار الکترونی را در حلقهٔ کیلیت یا ساختار مزدوج بررسی کرده و مورد مقایسه قرار داد. دامنهٔ کاربردپذیری NBO وسیع بوده و بین NBOبا NMR، دو قطبی شدن، انرژی، سازگاری متقابلی وجود داشته است،[2] به طوری که از تفسیر داده‌های یک کمیت به خواص و ویژگی‌های کمیت بعدی پی می‌بریم بنابراین با توجه به اهمیت این اربیتالها،به توصیف وبررسی انها می پردازیم .اربیتالهای طبیعی ، اربیتالهای واحدی هستند که به وسیلهٔتوابع موج خودشان که به بهترین

$$\Gamma\,\Theta_k = \rho_k \Theta_k \qquad (k = 1, 2, \ldots.)$$

وجه آنها را توصیف می‌کند، انتخاب می‌شوند. از نظر ریاضی اربیتالهای طبیعی φ یک تابع موج Ψ، به عنوان ویژه اربیتالهای عملگر دانسیته کاهش یافته مرتبه اول (Γ)به صورت زیر تعریف می‌شوند

در این معادله ویژه مقدارρκ، جمعیت الکترونی یا عدد اشغال ویژه تابع ΘK را برای عملگر دانسیته الکترونی مولکول از تابع Ψ نشان می دهد[3].