



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

الجامعة: القادسية

الكلية: العلوم

القسم: علوم الكيمياء

### بحث حول

دراسة الخواص الكيميائية والفيزيائية لجزيئة ( 4 – nitrophenol ) باستخدام  
طريقة هارترى – فوك

بحث مقدم من قبل الطالبة

( **زهراء علاء عبد الحسين عبد الشهيد** ) الى قسم علوم

الكيمياء / كلية العلوم / جامعة القادسية وهو جزء من متطلبات

الحصول على درجة البكالوريوس في علوم الكيمياء

**بإشراف الدكتور**

**أ.م.د حميد جبار حزيان الجبوري**

الاهداء

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

﴿ يَرْفَعُ اللّٰهُ الَّذِیْنَ اٰمَنُوْا مِنْكُمْ وَالَّذِیْنَ اٰتَوْا

الْعِلْمَ دَرَجٰتٍ وَّاللّٰهُ بِمَا تَعْمَلُوْنَ خَبِیْرٌ ﴾

صدق الله العلي العظيم

سورة المجادلة، الآية ( 11 )

أ

### الاهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

( وَقُلْ اَعْمَلُوا فَسَيَرَى اللَّهُ عَمَلَكُمْ وَرَسُولُهُ وَالْمُؤْمِنُونَ )

صدق الله العظيم

الى من بلغ الرسالة وادى الامانة ... ونصح الامة ... الى نبي الرحمة ونور العالمين ...

سيدنا محمد صلى الله عليه واله وسلم

الى من كئله الله بالهبة والوقار ... الى من علمني العطاء بدون انتظار الى من  
احمل اسمه بكل افتخار ... ارجو من الله ان يمد في عمرك لتري ثمارا قد حان  
قطافها بعد طول انتظار وستبقى كلماتك نجوم اهتدي بها اليوم وفي الغد والى الابد  
" والدي العزيز "

الى حكمت .... وعلمي  
الى أدبي .... وحلمي  
الى طريقي .... المستقيم  
الى طريق .... الهدايه  
الى ينبوع الصبر والتفاؤل والامل الى كل من في الوجود وبعد الله ورسوله  
" والدي العزيزة "

في النهاية اتقدم بكلمة شكر لمشرف استحق كل التقدير والاحترام  
اعطى الكثير  
وما زال يعطي من وقته وفكره وجهده دون انتظار الثناء او الشكر

الدكتور

أ.م.د حميد جبار حزيان الجبوري

ب

**شكر وتقدير**

اعظم الشكر و اجزله وأكمله لله رب العالمين

على عظيم فضله وجزى احسانه ان اتم علي نعمته

ووفقتي لإتمام هذا العمل

بكل فخر واعتزاز اتقدم بجزيل الشكر والتقدير للدكتور

(**حميد جبار حزيان الجبوري**) المشرف على بحثي

لمتابعتة وتوجيهاته السديدة والشكر والتقدير لكل من

ساعدني وساندني وساهم معي في انجاز هذا العمل

## الفهرست

رقم الصفحة	الموضوع
أ	الايه
ب	الاهداء
ج	الشكر والتقدير
1	الفصل الاول / الكيمياء الحاسوبية وتطويرها
1	تطوير الكيمياء الحاسوبية
3	تطبيقات الكيمياء الحاسوبية
3	تقنية النانو والادوية
5	الكيمياء وحواسيب الكم
6	الفينولات
7	الفصل الثاني / معادلة شرودنكر
8	الدالة الوظيفية
9	الكثافة الالكترونية لزوج من الالكترونات
12	توضيح ال Basis set والتعريف العام لها
15	بعض الملاحظات المتعلقة بوظائف الاستقطاب
16	رسم الجزيئة ونسبة الخواص الكيميائية والفيزيائية بشكل صور الجزيئة ( 4 - nitrophenol )
17	رسم كثافة الشحنة والجهد الكهربائي لجزيئة ( 4 - nitrophenol )
18	مخططات توضيح ( Raman - Uv / vis - IR spectrum )
19	الفصل الثالث / Results and Discussion
19	جدول ( رقم 1 ) طول الاصرة بين ذرتي الجزيئة ( 4 - nitrophenol )
21	جدول رقم ( 2 ) يوضح طول الزاوية بين ثلاثة ذرات جزيئة
21	جدول رقم ( 3 ) يوضح زاوية المستوي لاربع ذرات لجزيئة ( 4 - nitrophenol )
22	المناطق التي تظهر فيها الاواصر والاطوال الموجية
23	Homo and Lumo
24	Atomic Charge
25	Bond orders Mulliken
26	انماط الاهتزاز
27	جدول يوضح انماط الاهتزاز
28	المناقشة / Homo and Lumo

29	فرق الجهد الكهربائي
30	رسم يوضح الكثافة الإلكترونية
31	المصادر

## الفصل الاول

### (1-1) ماهي الكيمياء الحاسوبية؟

الكيمياء الحاسوبية هي استخدام الحاسوب لمعرفة التراكيب والتفاعلات الجزيئية، ونما هذا المجال خلال عقود قليلة مضت بسبب التطور الهائل في الحواسيب والبرمجيات، وزيادة كفاءتها واستخدامها لحساب خواص الجزيئات في كثير من التطبيقات في علم الكيمياء.

### (1-2) تطور الكيمياء الحاسوبية

تعود جذور الكيمياء الحاسوبية إلى المحاولات المبكرة لعلماء الفيزياء النظرية، والتي بدأت في عام 1928 لحل معادلة شرودنجر باستخدام آلات حسابية ميكانيكية. لقد تحققت هذه الحسابات من أن حلول معادلة شرودنجر استنسخت كمياً خصائص ملحوظة تجريبياً للأنظمة البسيطة مثل ذرة الهليوم وجزء الهيدروجين. تلك الحلول التقريبية للأنظمة الأكبر والحلول الدقيقة لمشكلات النماذج البسيطة سمحت للكيميائيين والفيزيائيين بتقديم تفسيرات نوعية لأطياف، وبنية، وتفاعلية لجميع أنواع المواد.

خلال الحرب العالمية الثانية تم اختراع أجهزة الكمبيوتر الإلكترونية، وفي العقد التالي للحرب أصبحت هذه الأجهزة متاحة للاستخدام العام من قبل العلماء، ابتداءً من منتصف خمسينيات القرن العشرين، تم تطوير تخصص جديد بشكل أساسي من قبل الكيميائيين. حيث تم إجراء محاولات جادة للحصول على معلومات كمية عن سلوك الجزيئات من خلال التقريب العددي لحل معادلة شرودنجر، والتي تم الحصول عليها باستخدام الحاسوب. وقد جاء النجاح الحالي لهذا المجال بشكل كبير من الزيادة الهائلة في السرعة، وانخفاض تكلفة أجهزة الكمبيوتر، مع تحسينات مهمة تُعزى أيضاً إلى العديد من التطورات في الخوارزميات (algorithms) والمنهجية (methodology).

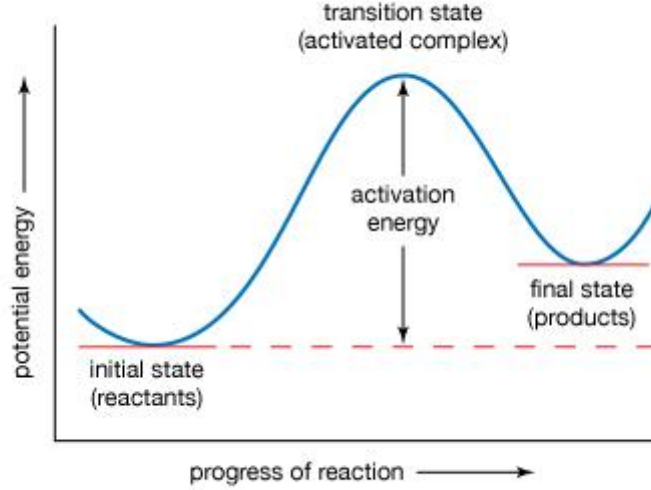
خلال الستينات من القرن الماضي، أدت تطورات في الخوارزميات والمنهجية إلى الاستفادة من كيمياء الكم، وظهرت هذه التطورات في العديد من حزم البرامج التي كانت متاحة بسهولة لمعظم الكيميائيين في أوائل السبعينيات على يد الثلاثي مارتن كاربلس ومايكل ليفيت وأورييه ورسيل، ولذلك حازوا نوبل في الكيمياء عام 2013 لتطويرهم الكيمياء الحاسوبية؛ مما أدى إلى انفجار في التطبيقات الحاسوبية للمسائل الكيميائية. تستخدم هذه البرامج للتنبؤ وتفسير بنية الجزيئات وتفاعلاتها وتكميل المعلومات التي تم الحصول عليها من العديد من أنواع القياسات الطيفية، وبطبيعة الحال استمر تطور البرامج من تلك التي استخدمت لدراسة أنظمة أحادية أو ثنائية الذرة في عام 1928 إلى تلك التي استخدمت لدراسة نظم ثنائية أو خماسية الذرة في عام 1970، إلى البرامج الحالية التي تنتج نتائج كمية مفيدة للجزيئات التي يصل تكوينها إلى 10 إلى 20 ذرة.

منذ عام 1980 أصبح استخدام هذه البرامج أداة روتينية لنمذجة الجزيئات والتفاعلات الكيميائية في المرحلة الغازية، في هذه الأثناء استخدم الكيميائيون تقريباً أبسط لتقدير طاقة الجزيئات بالقرب من حالة اتزانها. في منهج الميكانيكا الجزيئية، يساوي مجموع الطاقة في النظام الكيميائي تقريباً مقدار مجموع بعض المعطيات البسيطة التي تشمل المسافات بين الذرات وزوايا الرابطة. تتضمن هذه المعطيات المعلومات المقدرّة التي يفترض أن يكون لها نفس القيم التي لدى المعطيات التي تم الحصول عليها من بيانات لجزيئات أبسط. هذا التمثيل للطاقة جعل من الممكن نمذجة النظم البيولوجية وتصميم الأدوية بمساعدة العديد من البرامج التي تنتج صوراً ثلاثية الأبعاد للرسومات الحاسوبية للجزيئات. أصبحت الميكانيكا الجزيئية منتشرة لدرجة أن العديد من الكيميائيين يساؤونها الآن بالكيمياء الحاسوبية. وقد سمح هذا النهج النمذجة من الجزيئات مع الآلاف من الذرات.

وقد تبع ظهور ميكانيكا الكم الجزيئية ظهور نظرية ناجحة تفسر التفاعل الكيميائي تُسمى نظرية الحالة الانتقالية، وتفسر التفاعل الكيميائي كتجاوز المتفاعلات لمستوى معين من الطاقة، وتصبح في حالة انتقالية عالية الطاقة والتي بدورها تتحول إلى نواتج التفاعل، وهذا النموذج استخدم الطاقة كدالة لإحداثيات التفاعل، ظل هذا النموذج البسيط المفاهيمي هو النهج السائد لتقدير معدلات التفاعلات الكيميائية. ولكن بسبب تعدد النظام التفاعلي، فمن الصعب حسابياً تنفيذ ذلك بشكل صارم، فعلى مر السنين ركزت الجهود على تحسين أساليب تقدير حواجز التفاعل وخصائص المواد المتفاعلة، وتطلبت ذلك حلولاً أفضل للحالات الانتقالية الإلكترونية والنوية.



المهم إنه تم الاعتراف بنضج مجال الكيمياء الحاسوبية من خلال منح جائزة نوبل في الكيمياء عام 1998 إلى جون بوبل ووالتر كون لمساهمتهما في تطوير التقنيات الحاسوبية؛ من أجل توضيح التفاعلات والتراكيب الجزيئية.



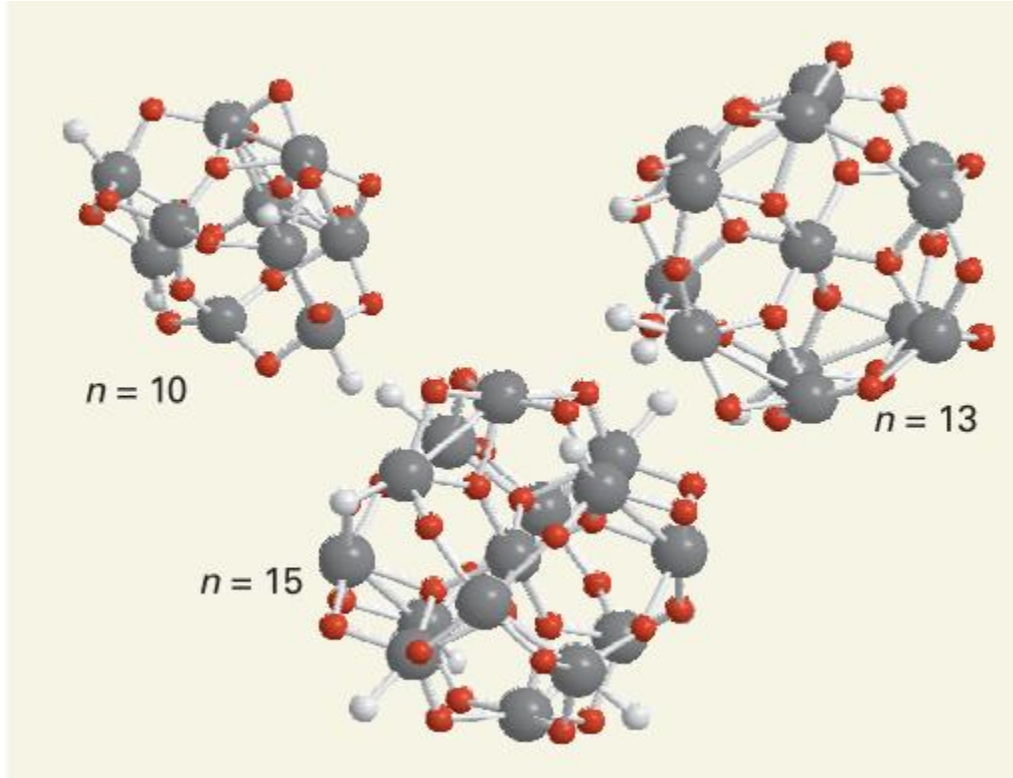
© Encyclopædia Britannica, Inc.

### (3-1) تطبيقات الكيمياء الحاسوبية

أصبحت لبرمجيات الحاسوب تطبيقات متعددة لحساب الخواص الكيميائية للكثير من المواد في المجالات العلمية البحتة، مثل الخواص الحرارية والكهربية والحسابات التي تتعلق بالتوزيع الإلكتروني لبعض المواد، وأيضًا في مجالات عملية مثل صناعة وتصميم الأدوية، وفي كيمياء البيئة والغلاف الجوي، وفي النانوتكنولوجي وفي علم المواد، ولنفهم ذلك سنستعرض مثالين :

#### 1. في تقنية النانو

تدور الدراسات حول أكاسيد أشباه الموصلات: كأكسيد الخارصين (ZnO) وأكسيد التيتانيوم ( $TiO_2$ ) كمحفزات ضوئية (تحفز التفاعلات الكيميائية من خلال امتصاص الضوء)، وخاصة الأخير لانخفاض تكلفته وكفاءته، ويوجد على هيئة تجمعات كريستالية تتم دراستها على مستوى النانو من خلال دراسات حاسوبية بواسطة نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) على تجمعات لذرات أكسيد التيتانيوم ( $(Ti_nO_{n+2})$ )، يتم التوصل على أكثر التراكيب استقرارًا وتأثير تلك الجسيمات النانوية على الخواص الكيميائية الضوئية، حيث أن شكل تجمع الذرات في الكريستالات وطريقة تحضيرها يؤثر على تأثيرها كعوامل حفازة، وبالتالي يؤثر على كفاءتها.



تجمعات لجزيئات أكسيد التيتانيوم مستقرة حُددت بواسطة حسابات «DFT»

## 2. في الأدوية

الدواء هو جزيء أو بروتين صغير يرتبط بموضع مستقبل محدد لجزيء مستهدف مثل: بروتين أكبر أو حمض نووي، ويمنع تقدم المرض. من أجل ابتكار علاجات فعالة، نحتاج إلى معرفة كيفية وصف وتحسين البنية ثلاثية الأبعاد للدواء، والتفاعلات الجزيئية بين الدواء وهدفه. كما يخضع ارتباط الرابطة أو النزول إلى بوليمر حيوي أو مضيف للتفاعلات الجزيئية، وتتضمن الأمثلة على المجمعات البيولوجية المضيفة للضيف: إنزيمات ومكونات الركيزة، ومجمعات مستضد – الجسم المضاد -، ومجمعات مستقبلات الأدوية. في جميع هذه الحالات يحتوي موقع على الضيف على مجموعات وظيفية يمكن أن تتفاعل مع مجموعات وظيفية متكاملة من المضيف، ويمكن للدراسات الحسابية تحديد مناطق جزيء يحتوي على كثافة إلكترونية عالية أو منخفضة. وعلاوة على ذلك، يسمح التمثيل البياني للنتائج العددية برؤية الخصائص الجزيئية مباشرة، مثل توزيع كثافة الإلكترونات، وبالتالي تعزيز قدرتنا على التنبؤ بطبيعة الاتصالات الجزيئية بين المضيف والضيف.

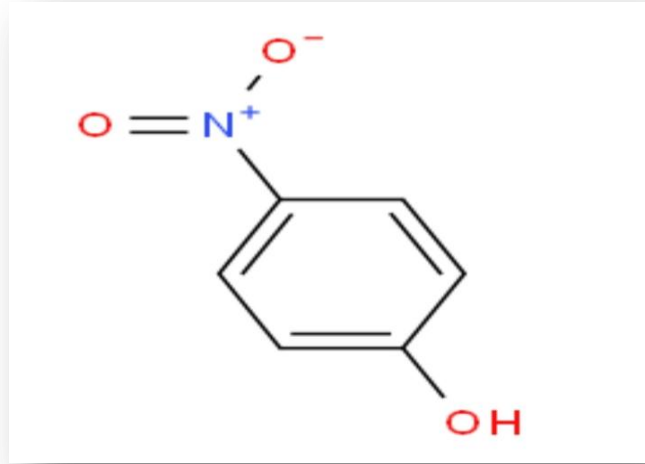
#### (4-1) . الكيمياء وحواسيب الكم

مؤخرًا حدثت موجة من التطورات في الأجهزة والبرامج الحاسوبية الكمومية منذ عام ، مما يشير إلى أنّ أجهزة الكمبيوتر الكمومية المفيدة في متناول اليد، ويمكن أن يتضمن تطبيقات تلك التقنية مسائل كيميائية كبيرة. في الواقع لقد حلم الباحثون باستخدام أجهزة الكمبيوتر الكمومية لمحاكاة الأنظمة الكيميائية منذ الثمانينيات، ويعتقد الكيميائيون أن هذه الآلات يمكن أن تساعد الباحثين على تطوير محفزات جديدة، وموصلات فائقة فائقة الحرارة، والمزيد المزيد.

## (4-1) الفينولات

مركبات مهمة في الصناعة الكيماوية اذ تستخدم مثلا مواد اولية في اصطناع بعض المواد البلاستيكية وال nitrophenol هو احد مركبات الفينولات .

4-nitrophenol هو احد مركبات الفينولات تركيبها الكيميائي كما موضح في الشكل :



## (5-1) استخدامات ال 4-nitrophenol :

- يستخدم في تصنيع الادوية
  - يدخل في تصنيع مبيدات الفطريات والمبيدات الحشرية
  - يستخدم في صناعة الاصباغ وتعقيم الجلد
  - يستخدم في تخليق البيبتيد
  - وفي المختبر يتم استخدامه في الكشف عن وجود نشاط PNPP الفوسفاتيز القلوية عن طريق التحلل المائي من hydrolytic في الظروف الاساسية فان وجود الانزيم سيحول الوعاء الاصفر .
- سيتناول هذا البحث دراسة مركب Nitrophenol نظريا باستخدام برنامج Gaussain09 لدراسة انماط اهتزاز الجزيئة وكذلك دراسة الشكل الهندسي للجزيئة.

## الفصل الثاني

### (1-2) معادلة شرودنجر Schrödinger equation

معادلة الاساسية التي يتعين حلها لوصف نظام يتكون مثلاً من العديد من الجزيئات او الذرات هي معادلة اروين شرودنجر المعروفة بمعادلة شرودنجر تكتب على الشكل الاتي:

$$H\varphi = \left[ - \sum_i^N \frac{h^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I^A \frac{h^2}{2m} \nabla_I^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{r_i^{\rightarrow} - R_I^{\rightarrow}} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_i^{\rightarrow} - r_j^{\rightarrow}} + \sum_{I<J} \frac{Z_I Z_J e^2}{R_I^{\rightarrow} - R_J^{\rightarrow}} \right] \varphi = E\varphi \dots \dots \dots (1-2)$$

حيث ان  $H^{\wedge}$  هو المؤثر الهاملتوني الكمي للمجموعة قيد الدرس و المكونه من Nالكترون (ذات الاساس i) و A لنوى الذرات ( ذات الاساس I) . الحدين الاولين من المؤثر الهاملتوني هما على التوالي هو مؤثر الطاقة الحركية للالكترونات ونوى الذرات على التوالي .اما الثلاثة المتبقية فهي تمثل مؤثرات الطاقة الوضعية او الجهد لمختلف التفاعلات البنية (الالكترون-النواة) و (الالكترون-الالكترون)و(النواة-النواة).

حل هذه المعادلة على حالتها هذه معقدة جداً،ولكن باستخدام تقريب بورن-اوبنهايمر الذي وضعه كل من ماكس بورن و روبرت اوبنهايمر اصبح ممكناً الى حد ما وهذا التقريب ينص على امكانية اهمال حركة النوى مقارنة مع حركة الالكترونات. وذلك راجع للكتلة النواة العالية و سرعتها البطيئة مقارنة بكتلة وسرعة الالكترونات هذا يمكننا من عزل حركة الالكترونات عن حركة النوى وتكون النتيجة الابقاء على الحدود التي تحتوي تمثل طاقة الالكترون الحركية و الوضعية بالاضافة الى طاقة الوضع الناتج عن تفاعل الالكترون مع النواة. وبهذا نكون قد اقتصرنا على حل معادلة شرودنجر للالكترونات ويمكننا اعادة كتابة المعادلة اعلاه على الشكل الاتي

$$H\varphi = [H^e + H_A]\varphi = E \quad (2-2)$$

$H^e$  هو الذي يحدد معادلة شرودنجر المتعددة الالكترونات:

$$H^e \varphi = [T + V_{ext} + U] \varphi = E^e \varphi \quad (2-3)$$

قد تم تطوير العديد من طرق الحل هذه المعادلة لكنها كانت تعتمد على الدوال الموجية كطريقة هرتري فوك توفر DFT طريقة بديلة تعتبر كثافة الإلكترونات هي الأساس لمعرفة خصائص المجموعة المدروسة.

## (2-2) الدالة الوظيفية

كائن رياضي يمثل علاقة رياضية نربط بها دالة بدالة اخرى عكس مفهوم الدالة العادية التي تربط بها دالة العدد ذو قيمة معينة. فمثلا الدالة الموجية  $\varphi(r^{\rightarrow})$  هي دالة عادية اما الطاقة  $E$  فيمكن التعبير عنها بدلالة  $E[\varphi(r_i^{\rightarrow})]$  فتسمى دالة وظيفية .

## (3-2) الكثافة الإلكترونية

احتمال العثور على الكترون متمركز في الموضع  $r^{\rightarrow}$  من بين العدد الاجمالي للالكترونات N في خير حجمه  $dr^{\rightarrow}$  هو :

$$n(r) d r^{\rightarrow} \quad (4-2)$$

حيث  $r(r)$  هو احتمال الكثافة الإلكترونية والذي يعرف بانه

$$n(r^{\rightarrow}) = N \int : \varphi(r_s^{\rightarrow}, r_2^{\rightarrow} s_2, \dots, r^{\rightarrow} N^s N :^2 d_s d_{s2} d_{r2}^{\rightarrow} \dots d_s N d_{rN}^{\rightarrow} \quad (5-2)$$

احتمال الكثافة الإلكترونية هو

$$\int n(r^{\rightarrow}) dr^{\rightarrow} = N$$

## (4-2) الكثافة الإلكترونية لزوج من الإلكترونات

كثافة زوج من الإلكترونات هو احتمال العثور في وقت واحد على اثنين من بين عدد من الإلكترونات و المتموضعين في وحدتين الحجم هي :

$$\iint n(r \rightarrow r') d_r d_r'$$

$$d_r d_r' \rightarrow = N(N-1) \int : \varphi(r_1 \rightarrow, r_1', s_1', r_2 \rightarrow, s_2, \dots, r_N \rightarrow, s_N) :^2 d_s d_s' d_{s_3} d_{r_3} \dots d_{s_N} d_{r_N} \quad (6-2) \quad n(r \rightarrow r')$$

يمكن حل معادلة شرودنغر للذرة المتعددة للإلكترونات العددية على الرغم من أن  $V_{electron-electron}$  لا يمكن تضمين كمصطلح واضح في هاملتون "الكيميائي" أنه يؤثر على  $(\varphi)$  يمكن حسابها من خلال نهج أبسط رياضياً: أن كل إلكترون يتفاعل مع متوسط النواة + جميع الإلكترونات الأخرى (المجال المتماسك الذاتي) التقريب .

تم تقديم التقنيات في الأصل من قبل  $(D.R Hartree)$  "قبل توفر الكمبيوتر" و  $V$

$Fock$  لمراعاة مبدأ باولي بشكل صحيح في الخطوط العريضة  $Hartree-Fock$  حقل ذاتي الاتساق  $(SCF)$

هناك نظام وحده يعرف ب الوحدة الذرية وحدة الكتلة في نظام الوحده الذرية هي كتلة الإلكترون في حين ان المسافة وحدة نصف قطر ذره  $Bohr$

يتم تعريف وحدة الطاقة من قبل  $Hartree$  ويمكن التعبير عنها بأسم

$$Hartree = \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a} = 27.21eV \quad (7-2)1)$$

معادلة (1-2) تحتوي على الحدود التي تتناثر بين الإلكترونات وبسبب هذا الحد ان المعادلة شرودنغر لا يمكن حلها بدقة . و بالتالي علينا ان نستخدم طريقة التقريب كل معادلة شرودنغر .

حيث تعود أبسط الطرق الى  $Hartree$  حيث افترض ان كل إلكترون يتحرك في نطاق جهد ينشأ من الكثرونات أخرى.

عدد حركة الإلكترونات  $(e)$  مستقلة عن بعضها البعض و بالتالي فان الدالة الموجية لمجموع الإلكترونات تساوي نتائج مضاعفة لوظائف الموجات الإلكترونية المفردة (المدارية).

$$\varphi(1,2,3, \dots, N) = \phi_1(1)\phi_2(2)\phi_3(3) \dots \phi_N(N) \quad \{8-2\}$$

$$\prod_{i=1}^N \phi_i(i) =$$

حيث  $\phi_i(i)$  يمثل وظيفة الاحداثيات المكانية للالكترونون ( $i$ ) حيث ان  $N$  هو عدد الالكترونات في الذرة.

واحد من الصعوبات و المشاكل الرئيسية في معادلة (8-2) ويمثل ذلك من خلال اهمال حركة ارتباط الالكترونات عند حركتها حول النواة ، ونتيجة لذلك سيختلف قياس طاقة التنافر عن القيمة الدقيقة ،

ويدعى هذا الاختلاف طاقة الارتباط ويهمل في نمط *Hartree* كما هو المذكور اعلاه .

كالقيمة التقريبية ل *Hartree* المذكورة في معادلة (8-2)

من الصعوبات والمشاكل الرئيسية في معادلة (8-2) هو اهمال حركة ارتباط الالكترونات عند تحركها حول النواة نتيجة لذلك سيتم اختلاف قياس طاقة التنافر من القيمة الدقيقة يدعى هذا الاختلاف طاقة الارتباط ويهمل في نمط *Hartree* كما هو مذكور اعلاه .

كتقريب هارتري في معادلة (8-2) لايمكن التحقق من مبدأ باولي ولا يمكن التحقق من خاصية مميزة بين الالكترونات وخاصةً دالة الموجة غير المشوشة من اجل التحقق من ان الفكرة المستخدمة تدور في عام 1930 وهذه الطريقة تسمى *Hartree-Fock Method* حيث تعالج نقطة الضعف في معادلة هاتري والدالة الموجية التي يحددها محدد *Slater*

$$\varphi(1,2,3, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{1(1)} & \phi_{1(2)} & \dots & \phi_{1(N)} \\ \phi_{2(1)} & \phi_{2(2)} & \dots & \phi_{2(N)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{N(1)} & \phi_{N(2)} & \dots & \phi_{N(N)} \end{vmatrix} \dots \dots \dots (9-2)$$



حيث ان  $\frac{1}{\sqrt{Ni}}$  هو عامل التطبيع و  $\emptyset_{i(i)}$  يمثل الوظيفة الدورانية التي تكون متعددة النتائج في وظيفة الموجة المكانية ووظيفة الدوران  $\alpha$  و  $\beta$  . العدد بين الاقواس يشير الى الالكترونات و العدد تحت الوظيفة يشير الى دوران الاوربتال (9)

تحديد Slater يمكن ان يتمييز كالآتي :

1-تحديد العلامة المتغيرة في استبدال صفين او عمودين في التحديد .

2-القيمة المحددة هي 0 اذا كان الصفين او العمودين في تحديد هي متعادلة .

الميزة الاولى تشير لذلك في تبادل الكترونين في هذا التحديد . العلامة المحددة هي متغيرة بون تغيير في قيمتها .بالتالي ،وظيفة الموجة تتحقق بأستثناء مبدأ باولي حيث هو التوافق العكسي .

بينما الميزة الثانية تعني ،اذا تعادل دوران اوربتالين في التحديد ،بالتالي القيمة المحددة تساوي للصفر وهذه المعادلة لأستثناء مبدأ باولي (في اي ذرة لايمكن ان يكون الرقم الكمي عليها)  $(n,l,m,ms)$  في الكترونين متعادلين).

مثلا رقم الدوران الكمي  $(\alpha$  و  $\beta)$  يجب ان يكون مختلف الى الكترونين متشابهين في وظيفة الموجة المكانية  $(\emptyset)$  (9).

معادلة (2-9) توضح ان التنافر يحدث في الالكترونات التي لديها دوران موازي اكثر من الالكترونات التي تمتلك دوران معاكس، التي هي اسباب لتقليل طاقة التنافر الكواومبية بين الالكترونات الدوران المتوازي وتشابهها ل قاعدة Hand's.

عن طريق فتح معادلة (2-9) نتائج  $N!$  حدود كل حد يتكون من نتائج متعددة في  $N$  من وظيفة الموجة بجسيمات منفردة ، $N$ ، في الحدود يعزى الى مستويات  $N$  مرة واحدة . بالاضافة تلك الحدود  $(N!)$  تغطي تقريبا الاحتمالات ممكنة التقليل في جسيمات  $N$ ، ومثال على ذلك حدود المرة الواحدة .

$$\emptyset_1(3), \emptyset_2(4), \dots \dots \dots \emptyset_N(N).$$

مثلا الجسيمات (3) تقع في مستوي 1 بينما الجسيمات (4) تقع في مستوى 2، وهكذا... (5).

## Basis Set(5-2)

هي مجموعة من الوظائف المستخدمة لانشاء المدارات الجزيئية والتي يتم توسيعها كتركيبية خطية مع معادلات يتم تحديدها

\* عادة ما تتركز هذه الوظائف على الذرات ولكن تم استخدام وظيفة تتمحور في السندات او الأزواج الوحيديين.

\* بالإضافة الى ذلك غالبا ما يستخدم استخدام اساس من تتوفر في انظمة تحول لا تتناسب مع الظروف الدورية .

وعادة ما يتم تنفيذ الحسابات الكيميائية الكومية ضمن مجموعة محدودة من وظائف اساس

\* هذه الوظائف اساسات ليست عادة المدارات الذرية الدقيقة حتى بالنسبة للذرات ذات الهوية الهوائية المقابلة وذلك بسبب تقريبي وتبسيط صيغتها التحليلية

\* اذا كان المبلغ المحدود هو توسيع نحو مجموعة كاملة من الوظائف يتم التقاليم عن الحسابات بأستخدام هذا المدى مجموعة اساسا الحد الاقصى للمجموعة .

في الايام الاولى للكيمياء الكومية تم استخدام مايسمى بالمدارات من نوع ( STOs ) Slater كوظائف اساسية بسبب تشابهها مع ذرات Hydrogen ان التعريف العام هو

$$S_{nlm}^E(r, \vartheta, \varphi) = Nr^{n-1}e^{-\delta r}Y_l^m(\vartheta, \varphi) \dots \dots \dots (10 - 2)$$

مع N كونه عامل تطبيع و  $l^m$  كونها التوافقيات الكروية

STOs لديه ميزة في ان لديهم تفسيرا فيزيائيا مباشرا وبالتالي فهي اساسا طبيعيا جيدا للمدارات الجزيئية

من وجهه نظر حوسبية، لدى STOs عيب شديد في ان معظم التكاملات المتساوية المطلوبة في سياق اجراء SCF يجب ان تحسب عدديا مما يقلل بشكل كبير من سرعة التحويل

في الاونة الاخيرة تم تطوير طرق عددية جديدة تسمح بحسابات SCF فعالة للغاية باستخدام STOs

يمكن تقريب STOs كمجموعة خطية من مدارات Gaussian orgitals .

Gaussian type (GTOs) يتم تعريفها على انها :

$$G_{ijk}^{\alpha,R}(r) = N_{ijk}^{\alpha}(x - R_1)^i(y - R_2)^j(z - R_3)^k e^{0\alpha(r-R)^2} \dots\dots\dots(11-2)$$

انها وظيفة ابسط وغالبا Gaussian , تسمى المركز واداة الدالة  $\alpha,R$  عامل تحريك عادي ،

$$N_{ijk}^{\alpha,R}$$
 هو

ماتسمى Primitives الغاوس

عادة ما يتم الحصول على الاولويات الغوسية من حساب الكم على الذرات (-Hartree.e. Fock or Hartree-Fock plus some correlated calculations,e.g.cl)

عادة تكون الاسس تختلف حتى يتم تحقيق ادنى طاقة اجمالية للذرة

بالنسبة للحسابات الجزيئية يجب التعاقد على هذه الاولويات الغاوسية اي ان مجموعات خطية معينة منها ستستخدم كوظائف اساسية والدعائم الثابتة.

لفهم السبب في امكانية تنفيذ التكاملات على GTOs عندما تنظر التكاملات القائمة على STO الى المنتجات المدارية  $\phi_a\phi_b$  و  $\phi_c\phi_d$  حيث تشير  $a,b,c, \text{ and } d$  الى مراكز ذرية مختلفة. هذه المنتجات تؤدي الى تكاملات متعددة المراكز والتي غالبا ما تنشأ في حسابات جزيئات *polyatomic* والتي لا يمكن تنفيذها بكفاءة عند استخدام *STOs* بالنسبة الى المدارات في نموذج *GOT*، تشمل هذه المنتجات على  $e^{-\alpha a(r-R_a)^2} e^{-\alpha c(r-R_c)^2}$  والتي يمكن اعادة كتابتها بالشكل الاتي :

$$e^{-\alpha a(r-R_a)^2} e^{-\alpha c(r-R_c)^2} = e^{-(\alpha a+\alpha c)^2} e^{-\alpha'(R_a-R_c)^2} \dots\dots\dots(12 - 2)$$

$$R' = \frac{\alpha_a R_a + \alpha_c R_c}{\alpha_a + \alpha_c} \dots\dots\dots(13 - 2)$$

Where

$$\text{And } \alpha' = \frac{\alpha_a \alpha_c}{\alpha_a + \alpha_c} \dots \dots \dots (14 - 2)$$

يكون منتج ال GOTS في مراكز مختلفة مساويا ل GOT واحد اخر في مركز 'R بين المراكز الاصلية ونتيجة لذلك يمكن كتابة تكامل مكون من اربعة مراكز على GOTS في صورة مكونين من الالكترون ثنائي المركز لا ينشأ اختزال مماثل بالنسبة للمدارس .

يتم استخدام مجموع اسس من الاحداثيات الفترائية  $L=i+j+k$  لوضع علامة على وظائف كنوع واحد (L=0) ، و (L=1) و (L=2) وهكذا ....

ومع ذلك تركيبات غاوسيان قادرة على تقريب خصائص النورد الصحيح من قبل مع مايزيد من ثلاثة نوع DT

نوع من كارتيسان غتوس غلو من غيار الناتج الدائتي

$$G_{200}^{\alpha,R} + G_{020}^{\alpha,R} + G_{002}^{\alpha,R} \alpha G_{000}^{\alpha,R} \dots \dots \dots (15 - 2)$$

اليوم هناك مئات من مجموعة تعيين من بينها هذه تسمى الحد الادنى من وظيفة البوابة المطلوبة لتمثيل كل الالكترونات على كل الوعرة.

اكبر من هذه يمكن ان تحتوي على عشرات حرفية الى مئات من وظيفة الحساسة الى كل من الذره الوظيفيه على كل وظيفة

اربعة انواع من غاوسيان يستخدمون لتمثيل D1 المداري من الهيدروجين كما:

$$\varphi_{1s} = 0.50907N1e^{-0.123317r^2} + 0.47449N2e^{-0.453757r^2} \dots \dots \dots (16 - 2)$$

$$+ 0.13424N3e^{-2.0133r^2} + 0.01906N4e^{-13.3615r^2} \dots \dots \dots (17 - 2)$$

حيث N هو ثابت تطبيع للحالة البدائية يمكن ان يتم تجميع المواد المتبادلة في تقلص وقد تم اخراج الاول فقط 1 بدائية

$$\varphi_{1s} = N1e^{-0.123317r^2}$$

و3 في البقايا الثانية

$$\phi_2 = N \left[ 0.4744N_2 e^{-0.453757r^2} + 0.13424N_3 e^{-2.0133r^2} + 0.01906N_4 e^{-13.3615r^2} \right]. \quad (18-2)$$

حيث  $n$  هو ثابت التطور للتكيف كله في هذه الحالة، 4 تعد مؤشرات بدائية تعتمد على 2 وظائف . ويرد في الكثير من الاحيان [2s]-----[4s] تعاقدت. يتم تثبيت المعاملات في الدالة في الحسب الجزيئي اللاحق.

(6-2) بعض الملاحظات المتعلقة بوظائف الاستقطاب

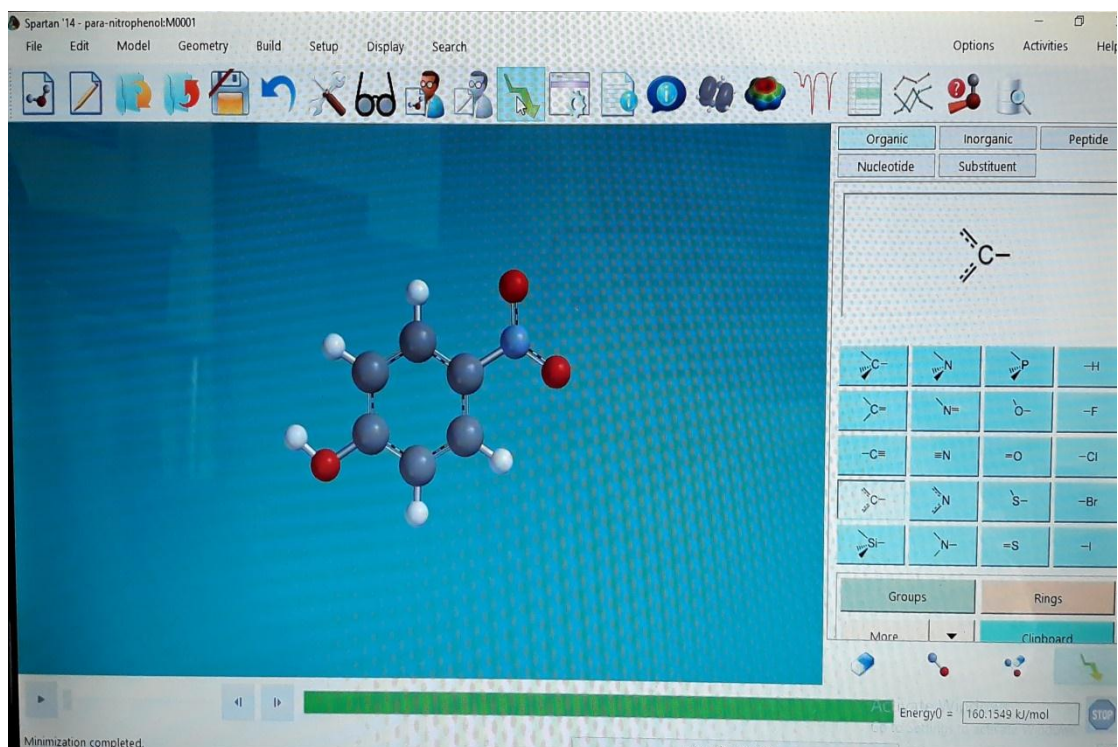
-لا يمكن اشتقاق معاملي وظائف الاستقطاب من حساب Hartree-Fock atome حيث ليست مأهولة .

-في الواقع يتم تقدير هذه الاسس "باستخدام قواعد الابهام الراسخة " او بواسطة استخدام مجموعة اختبار من الجزيئات .

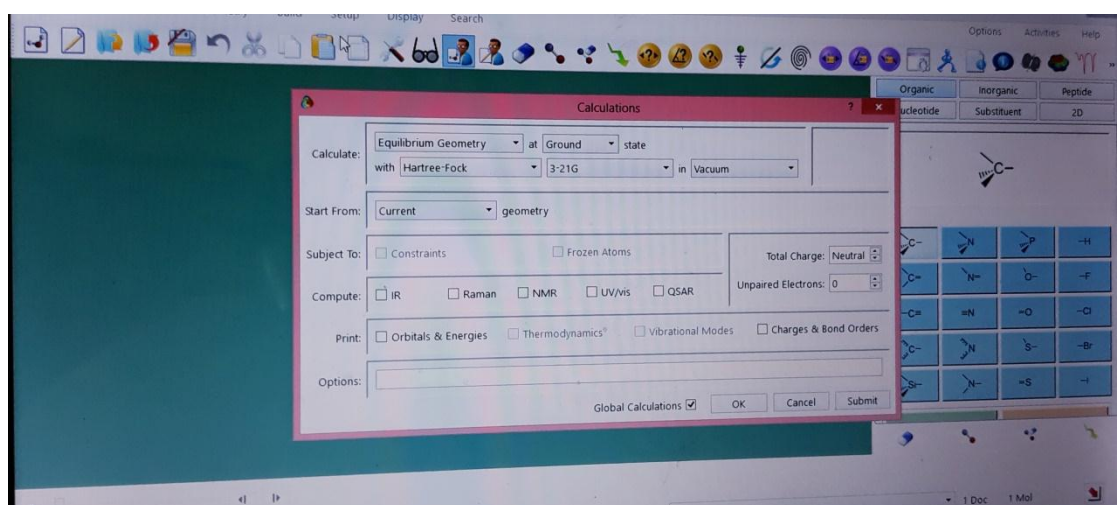
-وظائف الاستقطاب مهمة في استنساخ الروابط الكيميائية .

-ينبغي ان تدرج في جميع الحسابات التي يكون فيها الارتباط الالكترين مهما.

-تكون اضافتها مكافا يضيف اساس التعزيز مع وظائف الاستقطاب نوع d وظيفة اساس 5 على كل حين اضافة f وظائف نوع يضيف 7.

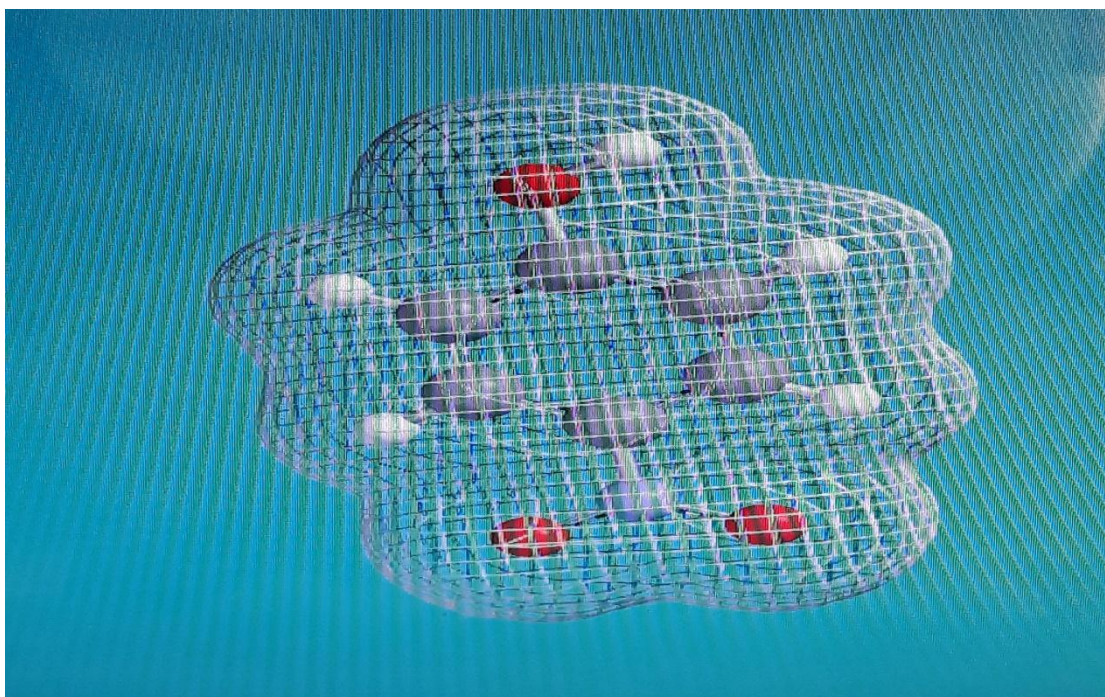


شكل رقم (1) يوضح محتوى رسم جزيئة (4-nitro phenal ) في برنامج  
sparan wavefunction

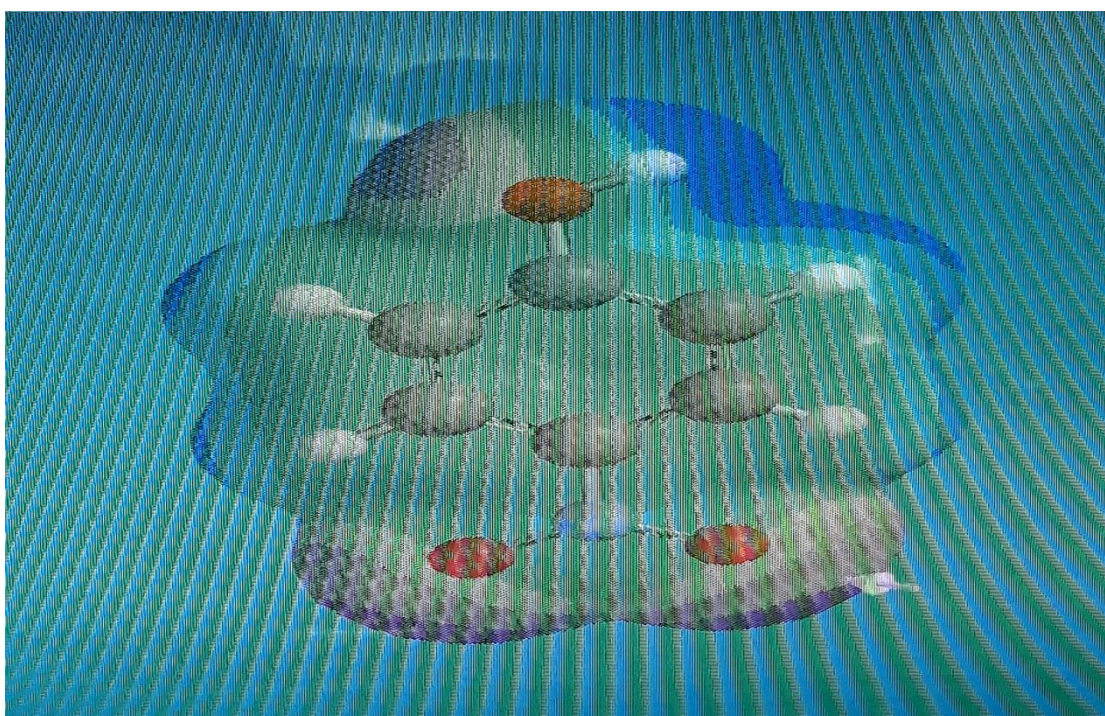


شكل رقم (2) يوضح نسبة خواص الكيميائية والفيزيائية لجزيئة (4-  
nitro phenal ) في برنامج sparans wavefunction

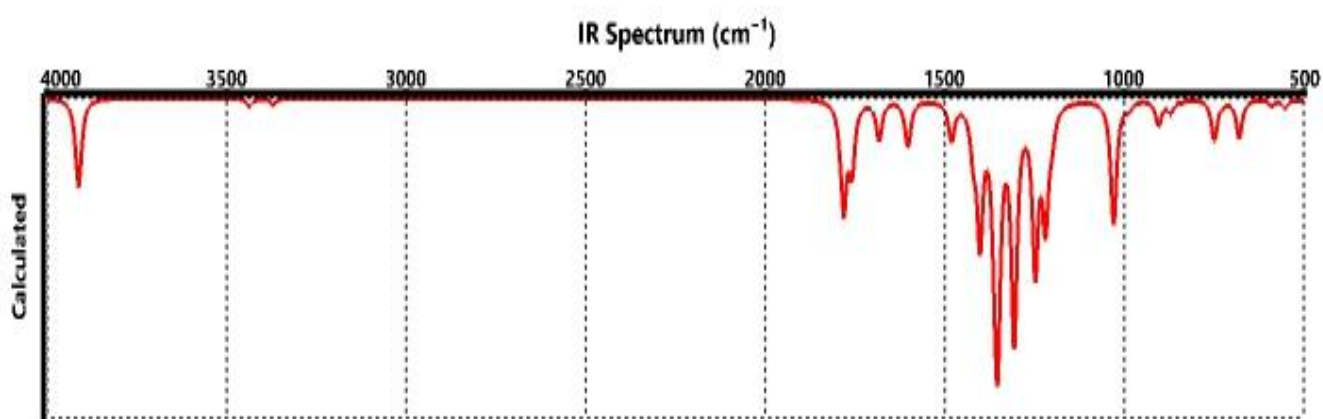
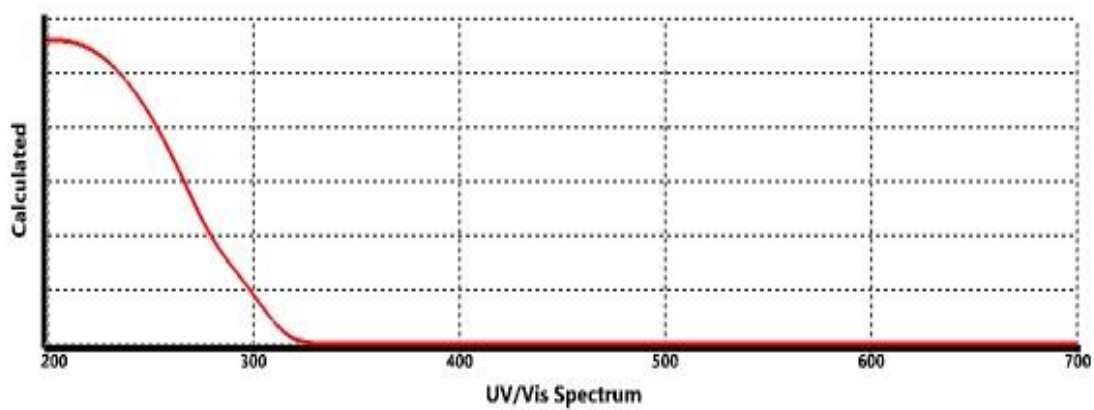
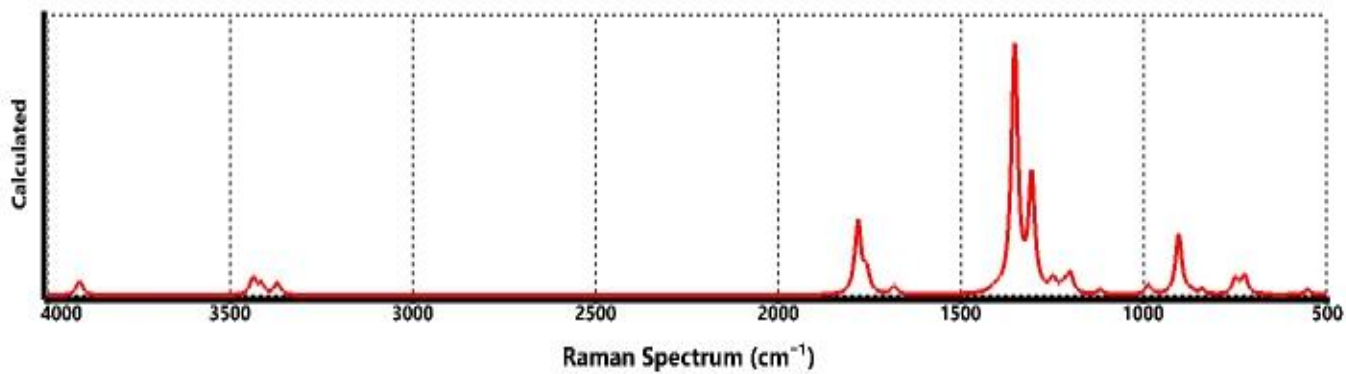




شكل رقم (5) يوضح كثافة الشحنة (4-nitro phenal)



شكل رقم (6) يوضح الجهد الكهربائي لجزيئة (4-nitro phenal)





## الفصل الثالث

### Results and Discussion

نستعرض في هذا الفصل النتائج النظرية لجزيئة nittrophenol التي تم ايجادها باستخدام برنامج Sparten weav function

### Geometry Meaning

تم حساب طول الاصرة بين ذرتين والزاوية بين ثلاثة ذرات والزاوية المستوي لاربع ذرات لجزيئة باستخدام نظرية ----وكما مبين في الجداول ادناه

شكل رقم (1) يوضح طول الاصرة بين ذرتين لجزيئة

Bond length	Actual
C(7)-H(15)	1.072
C(6)-H(14)	1.067
C(4)-H(13)	1.068
C(3)-H(12)	1.068
O(1)-H(11)	0.965
C(2)-C(7)	1.386
C(6)-C(7)	1.377
C(5)-C(6)	1.377
C(4)-C(5)	1.383
C(3)-C(4)	1.371
C(2)-C(3)	1.389
N(8)-O(10)	1.246
N(8)-O(9)	1.246
C(5)-N(8)	1.439
O(1)-C(2)	1.363

شكل رقم (2) يوضح طول الزاوية بين ثلاثة ذرات لجزيئة

Bond angle	Actual
O(10)-N(8)-O(9)	124.882
O(10)-N(8)-C(5)	117.484
O(9)-N(8)-C(5)	117.633
H(11)-O(1)-C(2)	113.965
H(15)-C(7)-C(2)	120.347
H(15)-C(7)-C(6)	119.615
C(2)-C(7)-C(6)	120.037
H(14)-C(6)-C(7)	121.464
H(14)-C(6)-C(5)	119.104
C(7)-C(6)-C(5)	119.432
C(6)-C(5)-C(4)	121.017
C(6)-C(5)-N(8)	119.410
C(4)-C(5)-N(8)	119.570
H(13)-C(4)-C(5)	119.004
H(13)-C(4)-C(3)	121.436
C(5)-C(4)-C(3)	119.560
H(12)-C(3)-C(4)	121.445
H(12)-C(3)-C(2)	118.556
C(4)-C(3)-C(2)	119.998
C(7)-C(2)-C(3)	119.951
C(7)-C(2)-O(1)	123.116
C(3)-C(2)-O(1)	116.932
C(7)-H(15)	1.072
C(6)-H(14)	1.067
C(4)-H(13)	1.068

شكل رقم (2) يوضح طول زاوية المستوي لاربع ذرات لجزيئة

م	179.568
O(1)-C(2)-C(7)-H(15)	-0.687
C(3)-C(2)-C(7)-C(6)	-0.615
C(3)-C(2)-C(7)-H(15)	179.130
C(5)-C(6)-C(7)-C(2)	0.038
C(5)-C(6)-C(7)-H(15)	-179.709
H(14)-C(6)-C(7)-C(2)	179.789
H(14)-C(6)-C(7)-H(15)	0.042
N(8)-C(5)-C(6)-C(7)	179.850
N(8)-C(5)-C(6)-H(14)	0.094
C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	0.405
C(4)-C(5)-C(6)-H(14)	-179.352
C(3)-C(4)-C(5)-N(8)	-179.709
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.264
H(13)-C(4)-C(5)-N(8)	0.091
H(13)-C(4)-C(5)-C(6)	179.536
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.319
C(2)-C(3)-C(4)-H(13)	179.886
H(12)-C(3)-C(4)-C(5)	179.311
H(12)-C(3)-C(4)-H(13)	-0.484
O(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-179.415
O(1)-C(2)-C(3)-H(12)	0.945
C(7)-C(2)-C(3)-C(4)	0.757
C(7)-C(2)-C(3)-H(12)	-178.884
C(4)-C(5)-N(8)-O(9)	-179.215
C(4)-C(5)-N(8)-O(10)	0.864
C(6)-C(5)-N(8)-O(9)	1.331
C(6)-C(5)-N(8)-O(10)	-178.590
H(11)-O(1)-C(2)-C(3)	179.943
H(11)-O(1)-C(2)-C(7)	-0.235

### ***O-H Vibration***

يظهر امتداد الموسع كشریط عريض للغاية في منطقة يتراوح طولها بين 3000-4000cm<sup>-1</sup>

-

### ***C-H Vibration***

تظهر المركبات التي تمتد C-C في هيكلها C-H تمتد فوق 3000 cm<sup>-1</sup>.

## **C=C Stretching**

في البنزين البديل تحدث الاهتزازات C-C في 1625-1430 cm<sup>-1</sup>.

## **NO<sub>2</sub> Stretch**

المركبات العطرية مع مجموعة نيترو تظهر اشرطة التمدد غير المتناظرة N-O بالقرب من 1690-1475CM<sup>-1</sup>.

## **C-NO<sub>2</sub>**

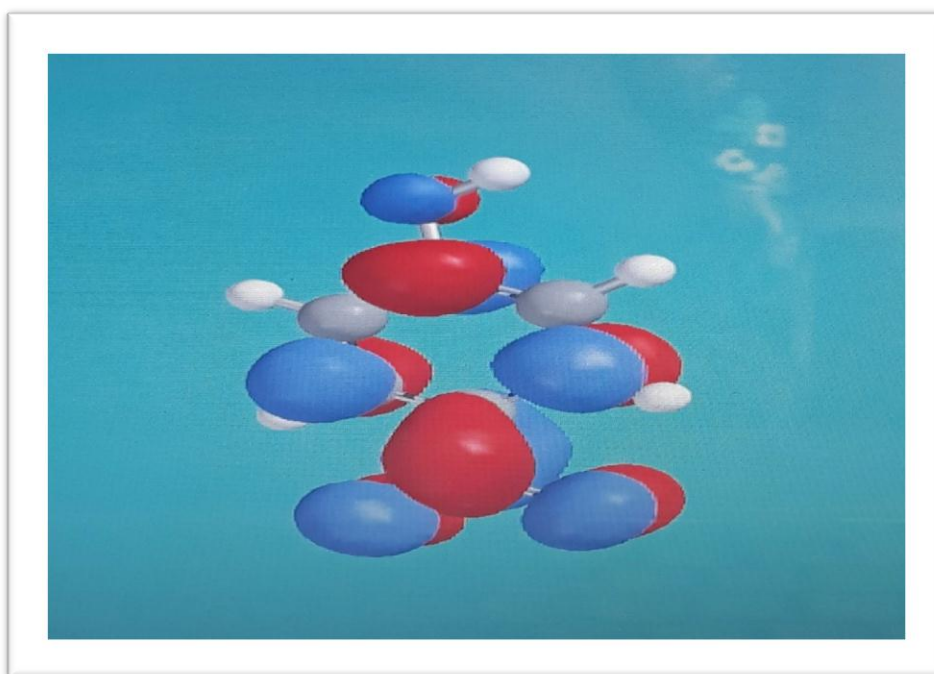
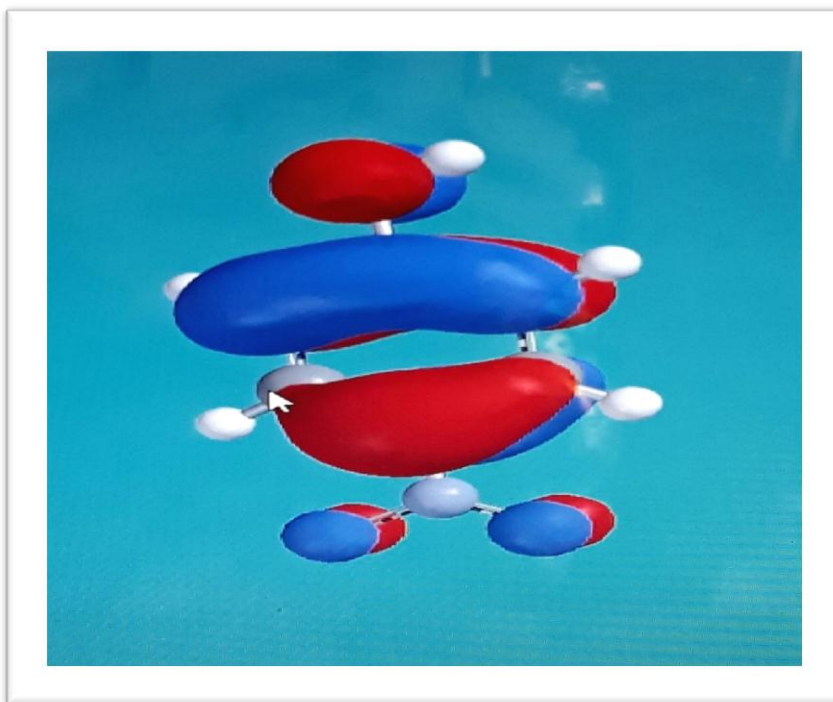
يتم ملاحظة اوضاع الاشعة تحت الحمراء لC-NO<sub>2</sub> في منطقة البصمات 1300-1100cm<sup>-1</sup>

## **C-OH**

تعزى الملاحظات التجليبية عند 1400cm<sup>-1</sup> من FT-IR و 1337cm<sup>-1</sup> من FT-Raman والقيم المسبقة نظريا 1376 و 1337 cm<sup>-1</sup> الى اهتزازات C-OH.

## HOMO and LUMO

تم حساب اعلى وادنى مستوى اوربيتال جزيئي (HOMO and LUMO) على التوالي لجزيئة 4-nitrophenol باستخدام طريقة Hartree-Fock-3-21G وتبين ان اعلى محتوى اوربيتال جزيئي يكون عند قيمة 9.42ev وادنى محتوى اوربيتال جزيئي عند قيمة 5.66ev-



## Atomic Charge

تم حساب لكل ذرة في جزيئة 4-nitrophenol باستخدام دالة Hartree-Fock-3-21G وكما مبين في الجدول الاتي :

### Electrostatic Mulliken Natural

1 H1	+0.178	+0.315	+0.282
2 C1	+0.050	-0.174	-0.152
3 C4	-0.464	-0.259	-0.317
4 C2	-0.254	+0.254	+0.019
5 C6	-0.552	-0.292	-0.359
6 C5	+0.714	+0.421	+0.410
7 C3	+0.005	-0.176	-0.160
8 H6	+0.226	+0.255	+0.250
9 H3	+0.182	+0.315	+0.282
10 H4	+0.244	+0.286	+0.269
11 O1	-0.735	-0.742	-0.696
12 H5	+0.493	+0.406	+0.483
13 N1	+0.913	+0.173	+0.504
14 O2	-0.505	-0.393	-0.410
15 O3	-0.496	-0.390	-0.406

## Bond orders Mulliken

1 C1	H1	0.891
2 C1	C4	0.091
3 C1	C2	1.361
4 C1	C6	1.411
5 C1	C5	-0.037
6 C1	C3	-0.036
7 C1	O2	0.035
8 C4	C2	-0.041
9 C4	C6	-0.041
10 C4	C5	1.319
11 C4	C3	1.450
12 C4	H4	0.931
13 C4	O1	0.028
14 C2	C6	-0.040
15 C2	C5	0.081
16 C2	C3	1.325
17 C2	N1	0.494
18 C6	C5	1.311
19 C6	C3	0.087
20 C6	H6	0.929
21 C6	O1	0.034
22 C5	C3	-0.036
23 C5	O1	0.840
24 C3	H3	0.892
25 C3	O3	0.033
26 O1	H5	0.795
27 N1	O2	1.406
28 N1	O3	1.410
29 O2	O3	0.294

## انماط الاهتزاز

بالنسبة الى جزيئة 4-nitrophenol حيث وجد ان الجزيئة تحتوي على 15 ذرة وعند استخدام المعادلة  $3n-6$  لحساب انماط الاهتزاز للجزيئة 4-nitrophenol وتم حساب انماط الاهتزاز دالة Hartree-Fock-3-21G.

لقد تم دراسة الحركة الاهتزازية للجزيئات الثنائية الذرة والتي تتمثل بالاهتزاز التمدي او استطارة Stretching Vibration الاواصر بين الذرتين غير ان الحركة الاهتزازية بدلالة حركات بسيطة تسمى انماط الاهتزاز Modes of Vibration. ويعتمد عدد الانماط الاهتزازية على عدد الذرات في الجزيئة .

فلو فرضنا ان جزيئة ما تحتوي على (N) من الذرات وان هذه الذرات مربوطة مع بعضها بواسطة اواصر ضعيفة الى حد ما. فاذا تم اختيار ثلاثة محاور (x,y,z) لوصف موقع حركة كل ذرة في الجزيئة. فسوف نحتاج الى  $3N$  من الاحداثيات لوصف حالة الجزيئة (النظام) ويمثل هذا العدد درجات الحرية للنظام Degrees of Freedom.

وتتوزع درجات الحرية هذه الى درجات حرية للحركة الانتقالية والدورانية والاهتزازية فالحركة الانتقالية لمركز الكتلة للجزيئة يتطلب ثلاث درجات حرية لانه يمكن تحديد موقع مركز الكتلة بثلاث احداثيات ديكارتية. اما الحركة الدورانية حول المحاور والرئيسية الثلاثة فتتطلب درجتى حرية بالنسبة للجزيئات الخطية وثلاث درجات للحرية بالنسبة للحركة الدورانية للجزيئة غير الخطية. حيث ان درجة الحرية الثالثة ناتجة من تدوير الجزئ حول محوره

وهكذا نرى ان الحركات الانتقالية والدورانية للجزئ غير الخطي تصفها ست درجات حرية. فاذا كان العدد الكلي لدرجات الحرية للجزئ تساوي  $3N$  فالباقي  $(3N-6)$  هو عدد درجات الحرية للحركة الاهتزازية. اما اذا كانت الجزيئة خطية فهذا يعني ان دورانها حول المحور يساوي صفر وبذلك يكون عدد درجات الحرية للحركة الاهتزازية  $(3N-5)$ .

لذلك فان عدد الانماط الاهتزازية الاساسية تكون مساوية الى  $(3N-5)$  للجزيئات الخطية. وفي كلتا الحالتين بالنسبة لجزيئة غير حلقيه تتالف من N من الذرات يكون عدد اواصرها مساوية الى  $(N-1)$ . وبذلك يمكن تقسيم درجات الحرية الاهتزازية الى عدد  $(N-1)$  من الاهتزازات التمديدية وما تبقى من درجات الحرية يكون للاهتزازات الانحنائية وعددها يساوي  $(2N-5)$  للجزيئات غير الخطية و  $(2N-4)$  للجزيئات الخطية.

فعلى سبيل المثال ،اذا كان لدينا جزيئة خطية ثنائية الذرة  $N=2$ ، فان عدد درجات الحرية الاهتزازية  $3N-5=1$ ، وهذا يعني وجود حركة اهتزاز من نوع فوق الاساسي .

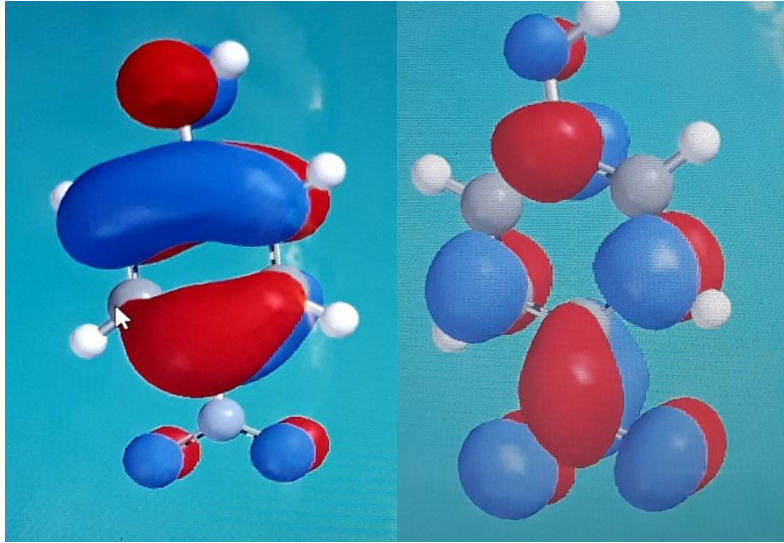
كما مبين في الجدول ادناه



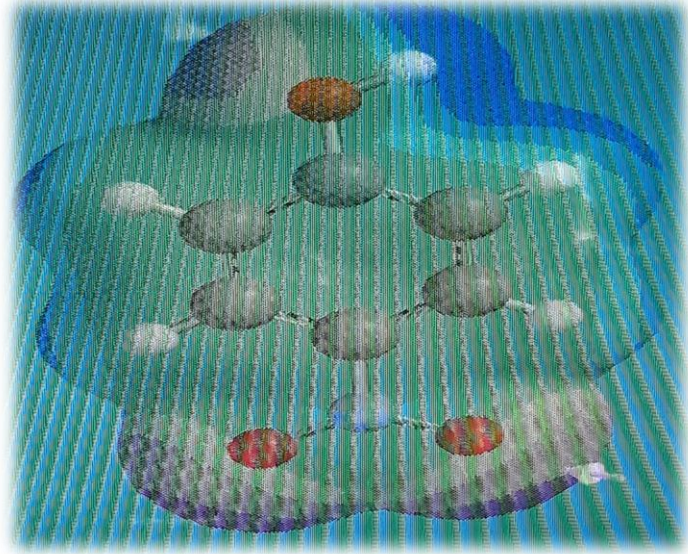
Modes	IR	Raman	HF
A1	3781s	3758vw	3763
A2	3119w	3085vw	3010
A3	3085vw		3006
A4			2991
A5			2978
A6	1613s	1585s	1699
A7	1590s	1522ms	1676
A8	1546ms		1609
A9	1514w		1540
A10	1450w	1423m	1459
A11	1400w	1337vs	1376
A12	1345ms		1283
A13	1326w		1250
A14	1287s	1278s	1209
A15	1217s	1217ms	1175
A16	1166ms	1180w	1148
A17	1113vs		1114
A18	1007w	1110s	1076
A19			1025
A20			1002
A21			964
A22	960vw		817
A23	851s	874ms	753
A24	828ms		735
A25	820ms		728
A26	755s		670
A27	694ms		621
A28	629s	622w	590
A29			579
A30			519
A31	535vw		487
A32	499w		449
A33	497w		372
A34			344
A35			296
A36			233
A37			183
A38			62
A39			

## المناقشة

### HOMO and LUMO



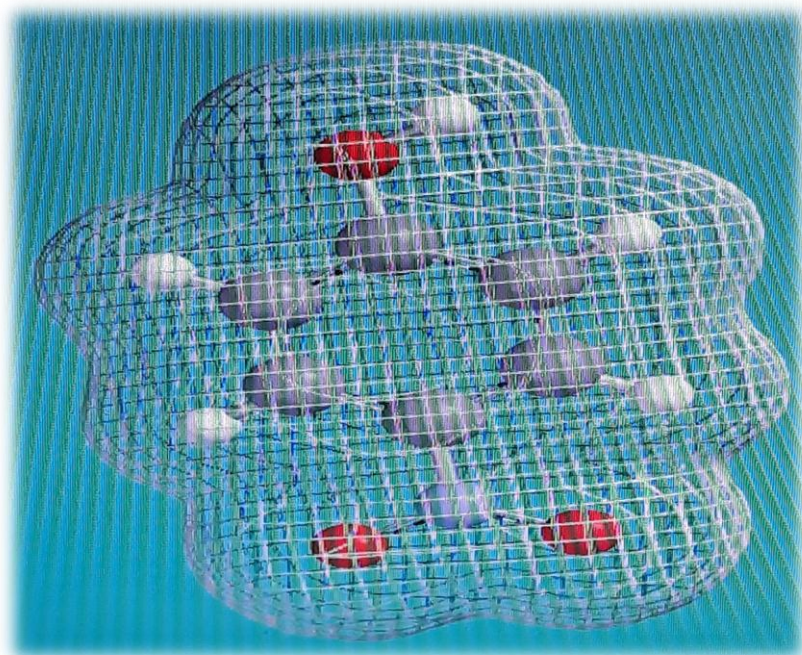
وفقا للنظرية المدارية الجزيئية الحدودية يمكن تقدير التفاعل الكيميائي النسبي للنظام الجزيئي باستخدام طاقات HOMO AND LUMO والمعاملات المدارية الذرية، الشحنات الذرية الصافية والتداخل بين المدارات الجزيئية . HOMO المداري هو اسهل مكان للتبرع الالكترونات ومدارات LUMO هو افضل مكان لقبول الالكترونات . تحدد فجوة الطاقة بين HOMO المانحة للالكترون LUMO الموصلية الالكترونية في جزيئات وبالتالي فهي تميز التفاعل الكيميائي الجزيئي والاستقرار الحركي .



شكل رقم(10) يوضح الجهد الكهربائي لجزيئه 4-nitrophenol

تعد الامكانات الالكتروستاتيكية الجزيئية اداة مفيدة في دراسة كيفية تفاعل النظام الجزيئي مع محيطه وهو مايفسر الاقصاء الكلي للالكترتون والامكانات الالكتروستاتيكية للجزيئات تعرض الشكل الثلاثي الابعاد لل MEP الشكل الجزيئي والحجم والانتشار القيم المحتملة للربوستات تشير الالوان المختلفة لخريطة MEP الى منطقة ثراء الالكترتون او فير الالكترتون على سطح الجزيء يظهر سطح الالكتروستاتيك الجزيئي 4-nitrophenol المرسوم باستخدام برنامج الكومبيوتر sparten wave function . كما موضح في شكل (10).

في العمل الحالي ،تم التعرف على التفاعل الكهربائي من خلال الامكانات الالكتروستاتيكية السلبية لذرات الاكسجين والمنطقة ذات الكثافة العالية للالكترتون وتمثلها باللون الاحمر حيث ان ذرات الاكسجين والنتروجين اكثر الكترونيا من ذرات الكربون والهيدروجين ويشير اللون الازرق للخريطة الي امكانية كهروستاتيكية ايجابية من ذرات H والهجوم النووي المقابل وانخفاض كثافة الالكترتون . الحد الاقصى لقيمة الكهرباء الساكنة المحتملة المحسوبة لجزيئ النيتروفيل هذا هو 4.



## المصادر

1. R.Dabestani,K.J.Reszka,M.E.Sigman,J.Photochem.Photobio.A Chem. 117,223(1998)
2. R.Jakubiak,Z.Bao,L.Rothberg,Synth.Met.114,61(2000)
3. F.Jensen,Introduction to Computational
4. R.G. Parr , R.G. Pearson , J . Am . chem . Soc . 105 , 7512 ( 1983 )
5. K.C. Gross , P.G . Seybold , C.M . Hadad , Int . J. Quant . chem . 90 . 445 ( 2002 )
6. R.S. Mulliken , J . chem . physs . 23 . 1833 ( 1955 )
7. R.S. Muliken , J . chem . physs . 23 . 1841 ( 1955 )
8. R.G. Parr , L.V. S zent paly . S . Liu , J . Am . chem . Soc . 121 , 1922 ( 1999 )
9. P.K . chattaraj , H . Lee , R . G . Parr , J . Am . chem . Soc . 113 . 1854 ( 1991 )
10. C. J . cramer , Essentials of computational chemistry ( Wiley , New York , 2002 )