

معالجة التركيب الإلكتروني والطيف الجزيئي لمركبات الأريل نيترون باستخدام نظرية الأفلاك الجزيئية

سعد الله قاري عزيز ، حسن البار و رفعت هلال

قسم الكيمياء ، كلية العلوم ، جامعة الملك عبد العزيز

جدة ، المملكة العربية السعودية

المستخلص . تمت دراسة التركيب الإلكتروني لبعض مركبات الأريل نيترون باستخدام طريقة MNDO-MO ، وذلك لحساب الشكل الهندسي عند الاتزان وتوزيع الكثافة الإلكترونية في هذه الجزيئات . وقد تم تحليل ومناقشة الفروق في الخواص الإلكترونية المختلفة بين النيترونات والأمينات المقابلة لها . وقد تم شرح وتحليل طيف الامتصاص الإلكتروني للمركبات المدروسة باستخدام نتائج حسابات الأفلاك الجزيئية . كما تم شرح تأثير المذيب على أساس التغير في توزيع كثافة الشحنة والتغير في عزم ثنائي القطب وانتشار الأفلاك الجزيئية . وقد أدت المقارنة بين طيف الامتصاص الإلكتروني للنيترونات والأمينات المقابلة لها إلى استنتاجات خاصة بالفرق في التركيب الإلكتروني بين هاتين المجموعتين من المركبات .