الخلاصة

تركِّز هذه الأطروحة على التركيب الإلكتروني للمركبات العضوية المعدنية من خلال سلسلة من التجارب الكمية. يقدِّم كل فصل نتائج شاملة مُستخلصة من تحاليل نظرية الكثافة الوظيفية لبنية المركب والتكافؤ الكيميائي. تُعد المعلومات المقدَّمة في هذه الدراسة بالغة الأهمية. علاوةً على ذلك، تساهم النتائج في الفهم الأكاديمي للبنى العضوية المعدنية وخواصها الإلكترونية. في الفصل الثالث، تم دراسة الليكاند باستخدام نظرية الذرات في الجزيئات في المركبات:

$[Se_2Cr_3(CO)_{10}]^{-2}$, $[Se_2Mo_3(CO)_{10}]^{-2}$, and $[Se_2W_3(CO)_{10}]^{-2}$

تم تحليل المعاملات الطوبولوجية للتفاعلات فلز-فلز وفلز-ليكند، وقد اتفقت النتائج مع النتائج السابقة للمركبات العضوية المعدنية المماثلة، حيث اشتملت المعاملات على الكثافة الالكترونية، ولابلاسيان الكثافة الالكترونية، الطاقة الحركية، المؤثر الهاملتوني، الطاقة الكامنة، الاهليلجية و مؤشرات الغاء تحديد موقع الاواصر. مؤشرات عدم التموضع لروابط الفلز-السيلينيوم ذات القيم المتوسطة تشير الى مشاركة ما يقارب نصف ازواج الالكترونات. في الفصل الرابع، تم تقدير الكثافة الالكترونية لتفاعل الرابطة الكيميائية في العناقيد باستخدام التحليل الطوبولوجي. كما توضح البيانات، فان المعقدات لا تحتوي على نقاط الرابطة الحرجة ومسارات الرابطة بين الكروم-الكروم، الموليبيديوم-الموليبيديوم، الكروم- الموليبيديوم. يتاثر وجود ذرات السيلينيد والتيلوريد الجسرية بشكل كبير بتوزيع الكثافة الالكترونية لتفاعلات الفلز-الفلز. نظرا لوجود قيم موجبة للكثافة الالكترونية وكذلك للابلاسيان وقيم سالبة لكثافة الطاقة الكلية، فان روابط الفلز-السيلينيد و الفلز-التيلوريد تظهرسمات طوبولوجية تساهمية وكهروستاتيكية. في الفصل الخامس، تؤكد نتائج النظرية الكمية للذرات في الجزيئات غياب النقاط الحرجة للرابطة ومسارات الروابط ذات الصلة بين ذرات المعدن التي تربطها ذرات السيلينيوم والتيليريوم في المعقدات ثلاثية النوى. بالنسبة لروابط الفلز- السيلينيوم و الفلز-التيليريوم، تكون كثافة الالكترونات عند النقاط الحرجة صغيرة على الرغم من ان قيم لابلاس كبيرة، بالاضافة الى ذلك، تتوافق القيم الصغيرة لكثافة الطاقة الحركية والقيم السالبة لكثافة الطاقة الكلية مع تلك الموجودة في الرباطة مفتوحة الغلاف النموذجية (ذات الطبيعة القطبية التساهمية المتوسطة). من المثير للاهتمام ان ذرات المعادن الانتقالية في العناقيد تعمل كمصارف (مساهمات سلبية) بدلا من مصادر، بينما تعمل ذرات الكالكوجينيد الجسرية كمصادر (مساهمات موجبة). في الفصل السادس، يقدم التحليل رؤية ثاقبة حول تفاعلات الحديد-الحديد، الحديد-الكبريت، الحديد-السلينيوم، الحديد-التيليريوم والحديد -الكاربون. ان