

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
Институт по органична химия с Център по фитохимия

Общоинститутски Семинар

Уважаеми колеги,

Институтът по органична химия с Център по фитохимия ви кани на *извънредно* заседание на общоинститутския семинар.

Програма:

11:00 – 11:45 – лекция на проф. Петър Карадаков, *University of York, UK*

Константите на екраниране: източник на информация за химичната връзка, ароматичността и антиароматичността

11:45 – 12:15 – дискусия

Семинарът ще се състои на 16 април 2014 г. (сряда) от 11 ч. в зала „Акад. Богдан Куртев“ на ИОХ-ЦФ – I^{вн} етаж, бл. 9, ул. Акад. Г. Бончев, София 1113.

Константите на екраниране: източник на информация за химичната връзка, ароматичността и антиароматичността

Петър Б. Карадаков

Department of Chemistry, University of York, Heslington, York, YO10 5DD, U.K.

Резюме: Константите на екраниране, добре познати от ЯМР, могат да бъдат дефинирани не само за ядрата на атомите в определена молекула, но също така за всяка точка от пространството, заобикалящо молекулата, в която има, макар и малка, електронна плътност. Константите на екраниране в точки от пространството, които не съвпадат с координатите на ядрата, не могат да бъдат измерени експериментално, но могат да бъдат изчислени, използвайки квантово-химичните методи предназначени за константите на екраниране на ядрата. Нашите резултати показват че изоповърхностите свързани с промените на константите на екраниране в пространството заобикалящо молекулите обясняват ясно разликите между ароматични и антиароматични системи, като бензол и циклобутadiен, и позволяват установяването на относителната ароматичност на хетероцикли като фуран, пирол и тиофен. Повечето от информацията за химичната връзка е свързана с анализи на общата електронна плътност, която може да бъде изчислена или наблюдавана експериментално чрез дифракция на рентгенови лъчи. Изоповърхностите свързани с промените на константите на екраниране в пространството заобикалящо молекулите предоставят много по-детайлна информация за природата на химичната връзка, отколкото електронната плътност. Допълнителната информация се дължи на факта, че константата на екраниране в точка от пространството близо до молекулата “усеща” поведението на електроните във всички направления започващи от тази точка, докато електронната плътност не предоставя информация за начина, по който електронната плътност ще се промени в близост до точката, освен тривиалния резултат че електронната плътност е гладка функция. В един от примерите, които ще бъдат показани в лекцията, изоповърхностите свързани с промените на константите на екраниране ясно различават “единичните” и “двойните” връзки в 1,3-бутadiена, докато електронната плътност върху тези връзки е визуално неразличима.