

التركيب الالكتروني لمركب (π C5H5)2Nbc12-) باستعمال طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي CN DO/1 التجريبية.

*حامد إبراهيم عبود
*جامعة بابل – كلية العلوم – قسم الفيزياء
*جامعة بابل – كلية العلوم للبنات – قسم فيزياء الليزر
*** جامعة بابل – كلية العلوم للبنات – قسم فيزياء الليزر

***جنان علي عبد

Abstract

The electronic distribution and energy levels of) π -C5H5)2Nbc12 have been studied theoretically using CN DO/1 semi empirical method.

The geometry optimization of the compound was obtained depending on the hartree–fock equation for the unrestricted systems by using STO-3G basis sets .

The molecular orbital calculations and energy level diagrams appears that the unpaired electron is in the unti bonding molecular orbital compounded out of $4dz^2$ ، $4dx^2 - y^2$

2 orbitals of niobium and chlorine $3p_z$, $3p_x$ orbitals.

الخلاصة:

تم في هذا البحث دراسة التوزيع الالكتروني لمركب داي سايكلونبيوم داي كلورايد نظريا باستعمال طريقة CNDO/1 شبه التجريبية .

تم الاعتماد على معادلات هارترى – فوك للانظمة غير المقيدة بدوال من نوع STO-3G كدوال أساسية لوصف المدارات الذرية للمركب والحصول على افضل أمثلية هندسية له . كما تم حساب القيم الذاتية وإيجاد معاملات المدارات الذرية التي تمثل الدوال الذاتية . تبين من خلال البحث ان الالكترون المنفرد يأخذ موضعه في

المدار الجزيئي لمجموعة التماثل A_1^* والذي اشتمل على مساهمات مدارات أيون النيبوم ، $4dz^2$ ،

$4d x^2 - y^2$ ومدارات الكلور ، $3p_z$ ، $3p_x$. ومن خلال مقارنة النتائج مع نتائج طرائق اخرى تبين ان الطريقة الحالية مناسبة في حساب وايجاد التوزيع الالكتروني لهذا المعقد المعدني كونها طريقة سريعة في اجراء الحسابات . كما توضح النتائج أيضا ان الفاصلة في تعدادية الالكترون المنفرد لمدارات أيون الكلور وآيون المعدن تجعل من هذا المركب يلعب دورا مهما في تسريع التفاعلات الكيميائية والذي يمكن استخدامه كعامل مساعد في اجراء عملية البلمرة.

المقدمة. Introduction

إن الحسابات النظرية في الفيزياء والكيمياء باستخدام طرائق مختلفة وبالاعتماد على الطرائق التامة (الاولية) ab-initio والطرائق شبه التجريبية semi empirical اصبحت واسعة الانتشار في السنوات الاخيرة . وتعد هذه الطرائق مهمة جدا في دراسة المواد وخصائصها الفيزيائية. كذلك التطور الهائل في مجال الحاسوب والبرامجيات قد ساعد كثيرا في زيادة الدقة في نتائج الحسابات اضافة الى سرعة الحصول على تلك النتائج النظرية. عدد كبير من الباحثين استخدموا الطرائق التامة والطرائق شبه التجريبية . على سبيل المثال ، قام (Laref, 2000) بدراسة التركيب الحزمي لبلمرة الجرمانيوم باستعمال الطرائق شبه التجريبية ، كما درس (Benzair and Aourag, 2003) الخصائص الالكترونية وحساب الطاقة الكلية لمركبات الخارصين باعتماد طريقة دالة الكثافة كونها طريقة تامة في الحسابات . كما قام (Jingzhi, 2004) بدراسة التركيب الالكتروني لبلمرات مختلفة بطريقة تعتمد على الترابط بين الميكانيك الجزيئي والطريقة التامة التي اعتمد فيها على تقريب هارترى – فوك. كما قام (Aboud, 2006) بدراسة التوزيع الالكتروني للمركب MnO2cl2 باستعمال الطريقة التامة والطريقة شبه التجريبية معتمدا على التركيب الخطي للدوال الذرية LCAO-MO ، كما قام (H.M.Abduljalil, 2009) وجماعته باستعمال طريقة CNDO بإيجاد التوزيع الالكتروني وحساب طاقات المركب ReOcl4.

في هذا البحث تم ايجاد التوزيع الالكتروني لمركب داي سايكلوبنيوم داي كلورايد باستخدام طريقة CNDO/1شبه التجريبية . ان الهدف الرئيسي من إجراء هذه الدراسة هو تصنيف المركب نظريا من خلال التوزيع الالكتروني له طبقا الى نظرية الزمر باستخدام التركيب الخطي للدوال الذرية كونه نموذجا للعوامل المساعدة من نوع زكلر – ناتا.

II. النظرية Theory

نظرية هارترتي – فوك Hartree - Fock Theory

في نظرية هارترتي – فوك HF، يتم تمثيل الدالة الموجبة بدلالة محددة سليتر (X1,X2,.....Xn)

والنتيجة من N من مجموعة دوال البرم { $\Psi_i(x)$ } ، حيث X تمثل كل من الموقع r والبرم w للإلكترون ϕ . كل دالة برم يمكن ان تملك نوعين من البرم ، احدهما يمثل جزء البرم للأعلى α وجزء البرم للأسفل β .

واللتان توصفات بالالتين (r) Ψ_i^α و Ψ_i^β ، على التوالي :

(Car and parrinello,1985,sherrill,2000) . لذلك فان دوال البرم يمكن ان تكتب كالتالي :-

$$\Psi_i(x) = \Psi_i^\alpha(r) \alpha(w) + \Psi_i^\beta(w) \beta(w) \dots\dots\dots(1)$$

في طريقة هارترتي – فوك للانظمة المفيدة (RHF)restricted والانظمة غير المفيدة

(UHF)unrestricted تكون كل دالة برم اما من نوع α او β . ففي طريقة (UHF) تكون مجموعتي الدوال الجزيئية molecular orbitals تكون معرفة بدلالة مجموعتين من المعاملات :

$$C^\alpha \text{ Mi}, C^\beta \text{ Mi} \text{ :- وكما ياتي}$$

$$\Psi_i^\alpha = \sum_{\mu=1}^n C_{\mu i}^\alpha \phi_\mu, \Psi_i^\beta = \sum_{\mu=1}^n C_{\mu i}^\beta \phi_\mu \dots\dots\dots(2)$$

تعرف الطاقة الالكترونية لنظام جزيئي [{ R }ⁱ و { C^e E^{μi} }^α و { C^β }^β] ،
بالعلاقة التالية: (Field,1991)

$$E_e = \sum_{i=1}^n \langle \text{xi} | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \text{xi} \rangle + \sum_{I=1}^m V_I(\mathbf{r}^i, \mathbf{R}^I) \langle \text{xi} | \text{xi} \rangle + \sum_{i=1}^n \sum_{j<i}^n [\text{xi} \text{xj} | \text{xi} \text{xj}] - \langle \text{xi} \text{xj} | \text{xixj} \rangle \dots\dots\dots(3)$$

حيث RI يمثل البعد بين النوى وان :-

$$V_I(\mathbf{r}^i, \mathbf{R}^I) = \frac{Z_I}{|\mathbf{r}^i - \mathbf{R}^I|}$$

لكل من الجزء الالكتروني ri وجزء النوى RI.

في تقريب بورن- اوبنهايمر Born-Oppenheimer approximation

(Field,1991,Hartke and carter)1992، يتم فصل حركة الالكترونات عند حركة النوى بسبب ان كتلة النوى اكبر بكثير من كتلة الالكترونات ،لذلك تعتبر حركة النوى في مجال سطح الطاقة الكامنة والتي تعطى بالعلاقة :

$$E(\{C_{\mu i}^\alpha, C_{\mu i}^\beta\}, \{R_I\}) = E_e E(\{C_{\mu i}^\alpha, C_{\mu i}^\beta\}, \{R_I\}) + \sum_{J<I}^M \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|}$$

الطرائق شبه التجريبية Semimpirical Methods

تستند هذه الطرائق بصورة رئيسية على طريقة المدار الجزيئي، حيث كل مدار جزيئي هو عبارة عن تركيب حطي للمدارات الذرية. تقوم الطرائق شبه التجريبية على اهمال بعض التكاملات ومنها تكامل التداخل overlap integrad لغرض تسريع الحسابات. عند مقارنة الطرائق شبه التجريبية بالطرائق التامة، نجد ان الحسابات شبه التجريبية اسرع بكثير من التامة (Thie) فمثلا k في طريقة التداخل التفاضلي الصغرى ZDO شبه التجريبية، يتم

إهمال تكاملات التنافر repulsion او التبادل exchange بين أي دالتين ذريتين مختلفتين (Kollmar, 1997).
بالاعتماد على طريقة المجال المتوافق ذاتيا (self consistent field (SCF)، يأخذ حل مسألة القيمة الذاتية الصيغة التالية:

$$(F C = SCE) \dots \dots \dots (5)$$

حيث F، C، S تشير الى مصفوفات فوك، المتجه الذاتي eigenvector والتداخل على التوالي. وان E هي مصفوفة طاقات المدارات.

ان تعامد الدوال الاساسية التي تصف النظام قيد الدراسة يؤدي للحصول على مسألة القيمة الذاتية القياسية التالية:

$$F^\lambda C^\lambda = C^\lambda E \dots \dots \dots (6)$$

حيث هو مقدار ينتج من تعامد الدوال الاساسية.

وبنفس الطريقة فان مسألة القيمة الذاتية باعتماد الطرائق شبه التجريبية تأخذ الصيغة التالية:

$$F^{NDDO} C^{NDDO} = C^{NDDO} E \dots \dots \dots (7)$$

حيث NDDO هو تقريب إهمال التداخل التفاضلي للذرات الثنائية، وحيث أن هذا التقريب يعتمد على نفس الأسس التي يعتمد عليها الإهمال التام للتداخل التفاضلي (CNDO) Complete neglect of differential overlap (Kolb and Thiel, 1993) فقد اعتمدنا في بحثنا هذا طريقة CNDO في إجراء الحسابات.

تأخذ عناصر مصفوفة فوك $F^{\mu\nu}$ الصيغة التالية:-

$$F^{\mu^A \nu^B} = H^{\mu^A \nu^B} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda^A} \sum_{\sigma^B} \rho_{\lambda^A} S^B (\mu^A \lambda^A, \nu^B \sigma^B) \dots (8)$$

حيث A، B تشير الى الذرات A، B المشار اليها بالمعاملات $\mu, \nu, \lambda, \sigma$. وان $H^{\mu\nu}$ و $P^{\lambda\sigma}$ هي عناصر مصفوفة هاملتون الإلكترون الواحد ومصفوفة الكثافة على التوالي، والتي تأخذ الصيغة التالية (Weber, 1996):

$$H^{\mu\nu} = \int \psi_\mu \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right) \psi_\nu dv \dots \dots \dots (9)$$

$$P^{\lambda\nu} = 2 \sum_{i=1}^{522} C^{\lambda i} C^{\sigma i} \dots \dots \dots (10)$$

وانه تكامل الإلكتروني two – electron integral يأخذ الصيغة التالية:-

$$) \mu\nu, \lambda\sigma) = \iint \psi_\mu(1) \psi_\nu(1) \frac{1}{r_{12}} \psi_\lambda(2) \psi_\sigma(2) dv_1 dv_2 \dots \dots \dots (11)$$

calculations and result

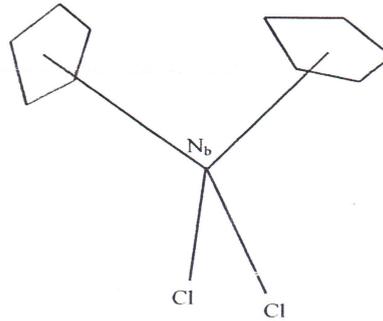
III. الحسابات والنتائج

قبل البدء بإجراء الحسابات يكون من الضروري جدا الحصول على افضل امثله هندسيه optimization geometry للمركب قيد الدراسة حيث يتم الحصول على اوطا قيمه طاقة المركب اذ تحسب القوى مع الذرات من خلال ايجاد انحدار الطاقة نسبه الى مواقع واحداثيات تلك الذرات.

في البرامجيات الخاصه بتقريبات الميكانيك الكمي كما هو الحال في برامج ((w.weber, 2000) Gaussian يتم التوصل الى افضل امثلية هندسية من خلال الحصول على مصفوفه الاحداثيات الديكارتية والتي تسمى z-matrix يتمدد من خلالها مواقع الذرات باستخدام ثلاث معاملات هندسيه وهي:

- 1- طول الصره r بينيه اي ذرتين (I, j)
- 2- زاويه الاصره θ عند ذرة j بين الخط الواصل لذرتي ال i-j والخط الواصل (I, j, k), $\theta(I, j, k)$
- 3- الزاويه ϕ الناتجة بين مستويين I j-k و I j-k $\phi(I, j, k, l)$

ان الامثلية الهندسية للمركب قيد الدراسة تم الحصول عليها باستعمال برنامج 2000 alchemy بتكرار يصل الى 50 مره لطريقة الاهمال التام للتداخل التفاضلي لنظام غير مقيد UHF باستعمال التركيب الخطي للدوال الذرية من نوع دوال سليتر (STO-3G) كدوال اساسيه .



الشكل (1-2) الامثلية الهندسية للمركب

الشكل (1) يبين الامثلية الهندسية للمركب $\pi\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{NbCl}_2$

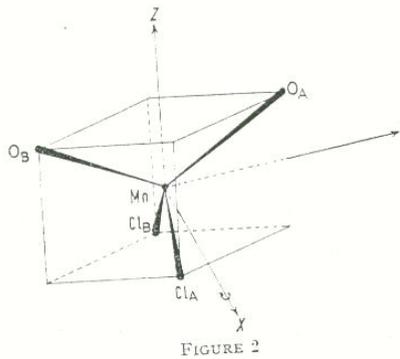


FIGURE 2

شكل رقم (2) نظام الإحداثيات الديكارتي للمركب

يمكن وصف المدارات الجزيئية بدلالة المدارات الذرية وكما يأتي:-

- 1- مدارات ايون المعدن Nb وهي $4d, 5s, 5p$
- 2- مدارات ايون الكلور cl وهي من نوع p.
- 3- التركيب الخطي لمدارات الحلقات الخماسية وهي :-

$$Cp1 = \frac{1}{\sqrt{5}} (\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 + \phi_5) = c p^o$$

$$Cp2 = \sqrt{\frac{2}{5}} \left\{ \phi_1 + \cos \frac{2\pi}{5} (\phi_2 + \phi_5) + \cos \frac{4\pi}{5} (\phi_3 + \phi_4) \right\}$$

$$Cp3 = \sqrt{\frac{2}{5}} \left\{ \sin \frac{2\pi}{5} (\phi_2 - \phi_5) + \sin \frac{4\pi}{5} (\phi_3 - \phi_4) \right\}$$

$$Cp4 = \sqrt{\frac{2}{5}} \left\{ \phi_1 + \cos \frac{4\pi}{5} (\phi_2 + \phi_5) + \cos \frac{2\pi}{5} (\phi_3 + \phi_4) \right\}$$

$$Cp5 = \sqrt{\frac{2}{5}} \left\{ \sin (\phi_2 - \phi_5) + \sin \frac{2\pi}{5} (\phi_3 - \phi_4) \right\}$$

ولكون المركب $\pi\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{NbCl}_2$ هو احد المعقدات المعدنية لذلك يمكن تصنيفه طبقا الى تماثل

المجموعة C_{2v} وعليه فان المدارات المذكورة اعلاه يمكن ترتيبها حسب هذا التصنيف بالجدول (2) وكالتالي

جدول رقم (2)

المدارات الذرية للمركب حسب مجموعة التماثل

A ₂ symmetry	A ₁ symmetry	Class
4d _{xv}	5s, 5p _z , 4d _{x² - y²} , d _{z²}	مدارات أيون المعدن
$p_y(A_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{yA} - p_{yB})$	$p_x(A_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{xA} - p_{xB})$ $p_x(A_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{zA} - p_{zB})$	مدارات أيون الكلور
$cp_1(A_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(3)_A - p(3)_B]$ $cp_2(A_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(5)_A - p(5)_B]$	$cp_0(A_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(1)_A - p(1)_B]$ $cp_1(A_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(2)_A - p(2)_B]$ $cp_2(A_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(4)_A - p(4)_B]$	مدارات الحلقات الخماسية
B ₂ symmetry	B ₁ symmetry	Class
4d _{vz} , 5p _v	4d _{xz} , 5p _x	مدارات أيون المعدن
$p_y(B_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{yA} + p_{yB})$	$p_x(B_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{xA} + p_{xB})$ $p_z(B_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_{zA} - p_{zB})$	مدارات أيون الكلور
$cp_0(B_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(1)_A - p(1)_B]$ $cp_1(B_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(2)_A - p(2)_B]$ $cp_2(B_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(4)_A - p(4)_B]$	$cp_1(B_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(3)_A - p(3)_B]$ $cp_2(B_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}[p(5)_A - p(5)_B]$	مدارات الحلقات الخماسية

ان نتائج حسابات التوزيع الإلكتروني في المدارات الجزيئية للمركب قيد الدراسة باستخدام طريقة الإهمال التام للتداخل التفاضلي CNDO/1 شبه التجريبية موضحة في الجدول رقم (3)

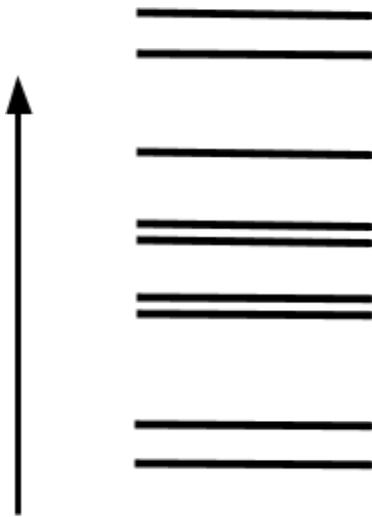
جدول رقم (3)
التوزيع الإلكتروني للمركب بالطريقة الحالية

A₁ symmetry										
رقم المدار	الطاقة (E(ev	معاملات المدار الذري								
		5s	5p _z	d _z ²	d _{x²-y²}	p _z	p _x	cp ₀	cp ₁	cp ₂
1	-50.10	0.009	0.201	-0.27 5	0.220	0.010	0.110	0.007	0.000	0001
2	-48.50	0.101	0.095	-0.30 5	0.090	0.701	0.008	-0.102	0.050	0.000
4	-23.80	-0.20 5	-0.10 1	0.435	0.205	0.009	-0.09 5	0.201	0.000	0.007
7	-20.82	0.220	0.095	-0.37 5	0.201	0.077	-0.09 5	0.009	0.00	0.007
11	-17.60	-0.20 0	-0.20 7	-0.41 0	0.200	0.101	0.089	0.078	0.205	0.000
18*	-11.81	0.081	-0.07 5	0.778	0.395	0.201	0.070	0.001	0.077	-0.00 1
22	-8.48	0.101	-0.20 1	-0.51 5	0.301	0.101	0.091	-0.020	0.009	0.000
24	0.25	0.255	0.201	0.717	0.415	-0.201	0.213	-0.091	0.101	-0.00 2
25	1.12	-0.31 0	-0.07 1	-0.66 0	-0.310	0.101	0.085	0.0901	-0.01 0	0.007
A₂ symmetry										
رقم المدار	الطاقة (E(ev	معاملات المدار الذري								
		d _{xv}	p _v	cp ₁	Cp ₂					
3	-23.62	0.355	-0.805	0.000	-0.005					
8	-20.01	0.575	-0.332	0.275	0.001					
14	-14.80	0.689	0.105	-0.205	0.000					
15	-14.48	0.578	-0.210	0.275	0.005					
B₁ symmetry										
رقم المدار	الطاقة (E(ev	معاملات المدار الذري								
		5p _z	d _z	p _z	p _x	cp ₁	cp ₂			
5	-24.01	0.099	-0.106	-0.110	0.435	0.000	-0.001			
6	-20.90	-0.031	0.201	0.0802	-0.309	-0.000	0.002			
9	-18.30	-0.037	-0.311	0.077	-0.062	-0.605	0.000			
12	-18.88	-0.075	-0.415	0.055	0.081	0.402	0.101			
17	-12.32	-0.442	0.091	0.300	-0.020	0.201	0.416			
20	-9.78	0.795	0.090	-0.220	0.101	0.110	0.105			
B₂ symmetry										
رقم المدار	الطاقة (E(ev	معاملات المدار الذري								
		5p _v	d _{vz}	p _v	cp ₀	cp ₁	cp ₂			
10	-18.02	-0.075	-0.305	-0.411	-0.001	0.000	0.006			

13	-16.42	0.066	0.251	0.501	0.201	0.000	0.001
16	-13.98	-0.098	-0.101	0.302	0.121	-0.401	0.000
19	-12.25	-0.120	0.605	0.201	0.080	0.120	0.005
21	-10.02	-0.436	0.102	-0.105	-0.335	0.305	-0.010
23	-8.10	-0.162	0.089	0.501	-0.101	0.060	0.405

حيث تمثل النتائج مستويات الطاقة ومعاملات المدار الذري C^{ii} باعتماد التركيب الخطي للمدارات الذرية .
 من خلال النتائج نجد ان الالكترون المنفرد electron unpaired يأخذ موقعه في المدار الغير المترابط
 الجزيئي (18) بالمجموعة التماثلية A_1^* .

الشكل (3) يمثل مخطط لمستويات الطاقة للمركب $\{ (NbCl_2 C_5H_5)_2 \} \pi -$ باستخدام طريقة CNDO
 شبه التجريبية .



الطاقة ev

(شكل 3)

مخطط مستويات الطاقة للمركب قيد الدراسة بطريقة الاهمال التام للتداخل التفاضلي

الجدول (4) يوضح مقارنه للنتائج القيم الذاتية eigen values بالطريقة المستعملة في هذا البحث مع القيم الذاتية لنفس المركب باستعمال الطرائق التامة ab- initio وطريقة ZINDO/S شبه التجريبية .

جدول رقم (4)

المدارات الجزيئية والقيم الذاتية للمركب

طريقة ZINDO About H.I,2004	طريقة ab-initio About H.I,2004	الدراسة الحالية	رقم الدار الجزيئي
60.20-	17.35-	50.10-	1
58.65-	15.62-	48.50-	2
35.75-	14.60-	23.62-	3
34.02-	13.45-	23.80-	4
33.70-	12.98-	24.01-	5
31.35-	12.35-	20.90-	6
30.87-	11.60-	20.82-	7
30.10-	11.05-	20.01-	8
28.45-	10.87-	18.30-	9
28.15-	10.55-	18.02-	10
27.75-	9.92-	17.60-	11
27.10-	9.75-	18.88-	12
26.65-	9.47-	16.42-	13
24.92-	8.96-	14.80-	14
24.60-	9.10-	14.48-	15
24.35-	8.92-	13.98-	16
22.45-	7.60-	12.32-	17
21.90-	6.76-	11.81-	18
21.02-	6.02-	12.25-	19
20.12-	5.75-	9.78-	20
19.55-	5.22-	10.02-	21
18.60-	4.55-	8.48-	22
18.02-	3.05-	8.10-	23
2.85	1.05	0.25	24

4.95	2.34	1.12	25
------	------	------	----

IV. المناقشة والاستنتاجات

من خلال النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام طريقة CNDO/1 شبه التجريبية نجد أن الإلكترون المنفرد يأخذ موقعه في المدار الجزيئي (18) غير المترابط من المجموعة التماثلية A_1^* ، وان أكبر مساهمة للمدارات الذرية في المدار الجزيئي هي المدارات dz^2 و $dx^2 - y^2$ من المعدن Nb. كما نجد ان الإلكترون المنفرد لا يأخذ له موضع على المدارات الذرية للحلقة الخماسية .
توضح النتائج أن هناك فاصلة في تعدادية الإلكترون المنفرد بين المدارات الذرية للمعدن ومدارات كل من ايون الكلور والحلقات الخماسية مما يجعل من هذا النوع من المركبات معقدات فعالة وبالتالي يمكن استعمالها كعوامل مساعدة في إجراء التفاعلات الكيميائية ، حيث يمكن استعماله في تسريع عملية البلمرة لكثير من الوحدات البنائية من خلال نتائج معاملات المدار الذري نجد إن تلك المساهمات للمدارات الذرية في المدار الجزيئي تعطي نتائج مقبولة فيزيائيا حيث انها تحقق علاقة بورن $(\psi / \Sigma = 1 / \Sigma^2 C_i^2)$ لمعاملات كل مدار جزيئي يتبين من خلال مقارنة نتائج القيم الذاتية للدراسة الحالية مع المصدر (about H,I 2004) إن هنالك تقارب جيد إلا إن هنالك بعض الاختلاف الذي يمكن إن يعزى إلى الطريقة المستعمله كونها قائمه على اهمال تعاملات التداخل بين إلكترونين وعموما فان الطريقة المستعمله في دراستنا هذه تعتبر طريق مناسبة للحصول على التوزيع الإلكتروني لهذه الأنواع من المعقدات المعدنية.

References

- *Abduljalil H.M , Amara Abo – alsoud ,obead R.M and A boud H.I, 2009 , Electronic Distribution of ReOCl4 using ab-initio and CNDO Semi empirical Methods , Journal of Babylon university , accepted in vol.18,no.1.
- * A boud H.I ,2006 , Theoretical study For the Electronic Distribution of MnO2Cl2 , Journal of Babylon University , vol.14, No.3.
- * A boud H.I ,2004, Approximation Treatment of Di- cyclo vanadium , Di – Cyclo Niobium and Di – Cyclo Tantalum Di-Chloride as a Model of Zigler – Natta , Ph.D Thesis , Basrah University.
- *Benzair A and Aourag H , 2003 , study of electronic properties of Zinc blende , using J.phys.state , sol (B),231,No.2,pp 411-422 Density Function Theory.
- *Car rand Parrinello M , 1985, Phy. Rev .Lett , 55 , 2471.
- *Field M. J, 1991, J. Phys . Chem , 95, 5140.
- *Hartke B and Carter E.A, 1992, J. chem .phys, 97 ,6569.
- *Jingazhi pu , 2004, Phys . chem , 108 , 632- 650 .
- *Kolb M and Theil W, 1993, J.Comput . Chem , 14, 775 -789.
- *Laref A, 2000 , Structure of cubic diamond by Tight Binding Method . Phys . stat . sol(B) , vol. 217, 991.
- *Sherrill C.D, 2000 , An Introduction to Hartree-Fock Molecular orbital Theory , Georgia Institute of Technology , Georgia.
- *Weber W, 1996 , Semi empirical SCF Calculation for semi Conductors , ph.D. Thesis , University Zurich.
- *Theil W, 2000, Semi empirical Methods John von Neuman Institute for computing Germany.