

<http://physicsweb.org/article/news/9/2/13>

2005/02/23

یک پی‌وند - شیمیایی جدید

یک گروه کوانتم‌شیمی پیشه در ملکول‌ها پی شامل - دو اتم - اورانیم نوع - جدیدی پی‌وند - شیمیایی کشف کرده است. در این پی‌وندها کلاً ده الکترون (معادل - پنج پی‌وند - کووالانس) دخیل اند. رکورد - قبلی ی بیش‌ترین تعداد - پی‌وند - کووالانس بین - دو اتم چهار بود [1].

پی‌وند - کووالانس معمولاً از یک زوج الکترون تشکیل می‌شود که بین - دو اتم مشترک اند. بسیاری از عنصرها پی‌وندهای کووالانس - یگانه، دوگانه، و سه‌گانه می‌سازند، و اگر تعداد - زیاد ی اربیتال - اتمی بتوانند در ساختن - پی‌وند شرکت کنند، تشکیل - پی‌وندهای پیچیده‌تری هم ممکن است. مثلاً شیمی پیشه‌ها طی - دهه ی 1960 بین - اتم‌ها ی فلزات - واسطه پی‌وند - چهارگانه هم کشف کردند.

لائرا گالیاردی [2] از دانش‌گاه - پالرم [3] و بیرون رُس [4] از مرکز - شیمی ی لوند [5]، با شبیه‌سازی‌ها ی کامپیوتری در کوانتم‌شیمی دریافته اند اورانیم (یک ی از آکتینیدها) می‌تواند - پی‌وند - کووالانس - پنج‌گانه بسازد. گالیاردی به فیزیکس وب [6] گفت: " شاید این کار بر توصیف ی از پی‌وند که در کتاب‌ها ی شیمی ارائه می‌شود اثر بگذارد."

هر اتم - اورانیم کلاً 16 اربیتال - اتمی دارد که می‌توانند در تشکیل - پی‌وند شرکت کنند. گالیاردی و رُس، ره‌یافت ی به اسم - CASSCF/CASPT2 به کاربردن که با آن شکل - ادغام‌شدن - اربیتال‌ها ی ظرفیت - یک اتم با اربیتال‌ها ی ظرفیت - اتم‌ها ی دیگر و پای‌دارترین پی‌وند - شیمیایی (یعنی حالت - با کمینه ی انرژی) را تعیین کنند.

گالیاردی و رُس دریافتند پی‌وند - اورانیم - اورانیم از همه ی پی‌وندهای دو اتمی ی شناخته‌شده ی دیگر پیچیده‌تر است: این پی‌وند شامل - سه پی‌وند - معمولی ی زوج الکترونی و چهار پی‌وند - ضعیف‌تر - تک الکترونی است. هم‌چنین شواهد ی

برای جفتش - فرومغناطیسی ی دوالکترون یافتند که هر یک در یک ی از اتم‌ها جای‌گزیده است. این یعنی همه ی شکل‌ها ی شناخته‌شده ی پی‌وند - کوالانس در این ملکول دیده می‌شوند.

این گروه بنا دارد کارش را به دیگر ملکول‌ها ی دی‌آکتینید و نیز اجزای شیمیایی ی بزرگ‌تر - شامل - ملکول‌ها ی دی‌اورانیم گسترش دهد.

- [1] Nature **433** 848
- [2] Laura Gagliardi
- [3] Palermo
- [4] Björn Roos
- [5] Lund
- [6] PhysicsWeb