ملخص:

يتناول موضوع الرسالة من وجهة نظر نظرية طريقة التنسيق والبنية الإلكترونية للمركبات المعدنية الانتقالية مع روابط الكاربينات وفقا لطبيعة المعدن. هناك العديد من مواقع التنسيق التي يمكن أن تؤدي إلى ظهور العديد من المتراكبات المصنفة بينها حسب طاقاتها النسبية. طريقة الحساب المستخدمة هي نظرية دالة الكثافة (DFT) وهذا بالنسبة لكل المجمعات المدروسة؛ باستخدام البرنامجين؛ ADF والقاعدة TZPو GAUSSIEN 09والقاعدة 6-31 ** G ++ مع المجموعات الوظيفية الهجينة B3LYP و B3PW91 و BP86غيرالهجين، .PW91PW91تم الصور والتمثيلات للهياكل الجزيئية باستخدام برامج Molden ,Gaussview,Molekel.

المخطوطة تغطي أربعة أجزاء. الأول هو مقدمة لنظرية الكثافة الوظيفية .(DFT) يدرس الجزء الثاني والثالث التركيب الجزيئي والإلكتروني لمركبات الكاربين والمعدن من النوع $[M (CO)_2Cl(NHC)]$:منها M: (M = V وMn و Co وRe و Rh) و NHC: (C_3N_2 ، أو $N_2H_6C_{11}O_2$) والجزء الرابع يتحدث فقط عن الهياكل الجزيئية لبعض مجمعات النحاس (دراسة الارتباط)

لقد درسنا في جميع الحالات الروابط المعدنية الكاربينيةالمختلفة، وقد وجدنا ان الرابطة تكون أقوى في العناصر المعتدلة الغنية بالإلكترونات (Re) مقارنة بالعناصر الغنية بالإلكترونات مثل.(Cu)

الكلمات المفتاحية

المجموعات الوظيفية غير الهجينة - المجموعات الوظيفية الهجينة - البنية الإلكترونية - دالة الكثافة