

Ontwikkeling van 'n nuwe kwantum chemiemodel vir die programmatiese analise van elektroniese struktuur

O (Otto-Louis) Venter, JH de Lange

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Otto-Louis Venter **E-pos:** otto-louis.venter@tuks.co.za

Development of a novel quantum chemical model for the programmatic analysis of electronic structure: A new FALDI-derived approach, coined as FALDI-MO, was used to examine the electronic structure of four simple B-N adducts. The utility of this approach was demonstrated in the decomposition of the molecular orbitals of these structures, alongside the identification of similar modes of electron (de)localisation.

Molekulêre orbitaalteorie (MOT) is een van die veelsydigste modelle vir die analise en voorspelling van die elektroniese eienskappe van molekules. Dit is wel interessant dat MOT minder gebruik vind in die analise van groter en asimmetriese sisteme as gevolg van die kompleksiteit van sulke sisteme. Hierdie navorsing handel oor die ontwikkeling van 'n nuwe model (FALDI-MO) om die elektroniese orbitaalstrukture van komplekse sisteme op 'n vereenvoudigde en selektiewe manier te analiseer. Die model is afgelei van en gebou op ons eie gelokaliseerde, gedelokaliseerde, interatomiese (FALDI) elektrondigheidskema, aangevul met verskeie nuwe Python-kodes vir addisionele berekeninge en programmatiese visualisering.

Die aanvanklike ontwikkeling van FALDI-MO het gebruik gemaak van N-heteroasikliese karbene (NAKs), maar dit is onlangs uitgebrei om diatomiese molekules, eenvoudige addukte (soos BF_3NH_3) en selfs groter koördinasie komplekse in te sluit. Ons wys dat hierdie model gemaklik verskillende elektroniese eienskappe kan identifiseer, naamlik unieke modusse van fragmentele, gelokaliseerde en gedelokaliseerde elektrondigheidsverspreidings. Verder sal ons aantoon hoe soortgelyke verspreidings outomaties geïdentifiseer kan word, wat dien as 'n stap tot die dekomposisie van die lys van molekulêre orbitale wat verkry word uit meeste moderne kwantumchemieprogramme.

Die ontwikkeling van orbitaalinteraksie-diagramme dien as 'n mens-interpreteerbare uitset van FALDI-MO. Die kombinasie van die orbitaalinteraksie-diagramme met bogenoemde stelle van soortgelyke verspreidings maak deure oop vir die instelbaarheid van teiken elektroniese eienskappe. Die dieper verstaan van elektroniese strukture, verskaf deur FALDI-MO, kan rasionale ontwerpprosesse ondersteun, of selfs leiding met die gebruik van masjienleermodelle bied.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 30-31 Oktober 2024, Universiteit van die Vrystaat. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Dr Ernie Langner (Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat); Dr Wynand Nel (Departement Rekenaarwetenskap en Informatika, Universiteit van die Vrystaat) en Prof Liesl van As (Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat).