نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی

بخش نخست

حسن حذرخانی
عضو هیأت علمی گروه شیمی دفتر برنامه‌ریزی و تألیف کتاب‌های درسی

چکیده

نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیکی، نمودارهای سه‌بعدی‌اند که با استفاده از روش‌های نیمه‌تجربی و محاسبه‌های رایانه‌ای به‌دست می‌آیند. این نقشه‌ها شکل و اندازهٔ مولکول را در سطح مولکول، همراه با علامت و بزرگی پتانسیل الکتریکی نشان می‌دهند.

کلیدواژه‌ها

انرژی پتانسیل، چگالی الکترونی

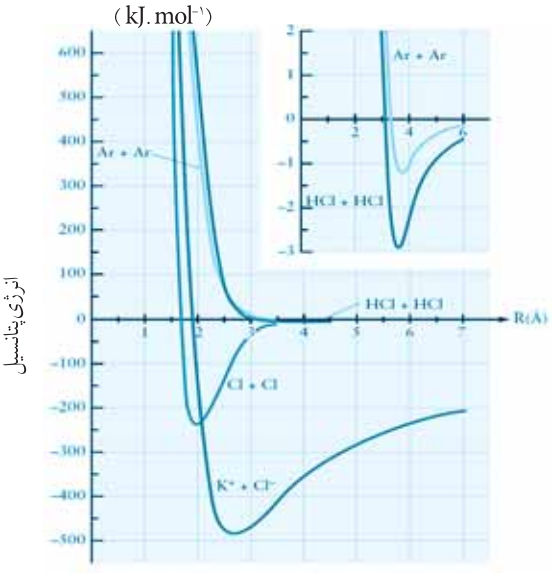
انرژی پتانسیل بین ذره‌های کوچک و ساده

انرژی پتانسیل بین ذره‌ها، به فاصلهٔ میان آن‌ها بستگی دارد. به بیان ساده‌تر، انرژی پتانسیل میان یک جفت یون یا یک جفت اتم، به فاصلهٔ موجود میان مرکز آن‌ها از یکدیگر وابسته است. همچنین فاصلهٔ میان دو مولکول – که از مرکز اتم با بار جزئی مثبت از یک مولکول، تا مرکز اتم با بار جزئی منفی از اتم مولکول همسایه در نظر گرفته می‌شود – تعیین‌کنندهٔ انرژی پتانسیل میان دو مولکول است.

در نمودار ۱، انرژی پتانسیل برای چند ذره مقایسه شده است. چنان‌که دیده می‌شود، با نزدیک شدن ذره‌ها به یکدیگر، علامت انرژی پتانسیل میان ذره‌ها منفی می‌شود، زیرا نیروهای جاذبه افزایش می‌یابند. در اینجا، برای هنگامی که ذره‌ها از یکدیگر دورند، انرژی پتانسیل برابر صفر در نظر گرفته شده است. پایین‌ترین نقطهٔ منحنی، نشان‌دهندهٔ فاصله‌ای است که در آن، نیروهای جاذبه و دافعه با هم در تعادلند. مقدارهای نسبی انرژی پتانسیل در این نقطه‌ها، قدرت نسبی نیروهای جاذبه را برای هر ذره نشان می‌دهند. در نتیجه، انرژی پتانسیل و قدرت نیروی جاذبه میان یون کلرید (Cl^-) با یون پتاسیم (K^+)، از انرژی پتانسیل میان بقیهٔ ذره‌ها بیشتر است. گفتنی است که این برهم‌کنش از برهم‌کنش میان دو اتم کلر در مولکول Cl- Cl نیز قوی‌تر است و می‌توان چنین نوشت:

برهم‌کنش میان اتم‌های Ar < برهم‌کنش میان H و Cl < برهم‌کنش میان دو اتم Cl < برهم‌کنش میان K^+ و Cl^-

Ar... Ar	HCl... HCl	Cl...Cl	K^+ ... Cl^-
نیروهای پراکندگی	نیروهای پراکندگی و دوقطبی – دوقطبی		



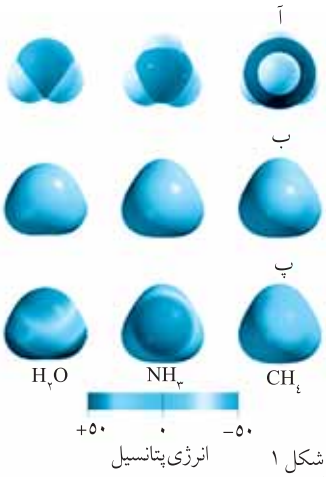
نمودار ۱ مقایسهٔ انرژی پتانسیل برای چند ذره

انرژی پتانسیل میان ذره‌های بزرگ و پیچیده

برهم‌کنش میان مولکول‌های بزرگ نه‌تنها به فاصلهٔ میان آن‌ها، بلکه به جهت‌گیری آن‌ها نسبت به هم بستگی دارد چنان‌که، برای توصیف کامل برهم‌کنش میان آن‌ها به یک نمودار سه‌بعدی انرژی پتانسیل نیاز داریم. به این منظور، با استفاده از روش‌های نیمه‌تجربی، محاسبه‌هایی انجام می‌گیرد تا نقطه‌های هم‌سطح از دیدگاه چگالی الکترونی مشخص شوند. سپس انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی مولکول رسم می‌شود و نقشهٔ آن به‌دست می‌آید.

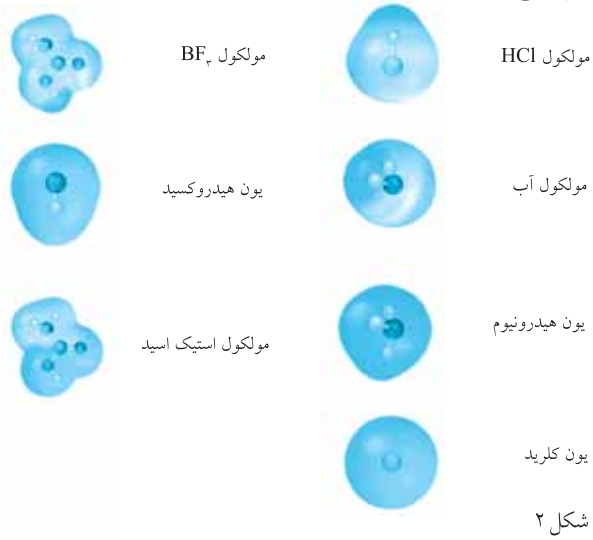
این نقشه‌ها، شکل و اندازهٔ مولکول و علامت و بزرگی انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی را در سطح مولکول، به خوبی نشان می‌دهند، شکل ۱.

درواقع، برای تعیین مقدار انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی برای هر نقطه از سطح مولکول، یک واحد بار مثبت را از روی آن عبور می‌دهند. حرکت این بار شبیه خزیدن یک حشره روی یک سطح است. این بار الکتریکی، هنگام گذر از سطح مولکول، با همهٔ الکترون‌ها و هستهٔ مولکول برهم‌کنش می‌کند. بزرگی بار به‌کار رفته باید بسیار کوچک باشد تا سبب قطبش‌پذیری و واپیچش در مولکول شود. در نتیجه، بار مثبت در حال عبور، جذب نقطه‌هایی می‌شود که انرژی پتانسیل منفی در آن‌ها به‌وجود آمده است در حالی‌که، از نقطه‌هایی که انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی مثبت دارند، دفع می‌شود.



شکل ۱
آ) مدل فضا پرکن
ب) نقطه‌های هم‌سطح از نظر چگالی الکترونی
پ) سطوح انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی

برای درک بهتر این فرایند، این یافته‌ها را با نسبت دادن یک رنگ به هر منطقه، در نقطه‌های هم‌سطح براساس علامت و بزرگی انرژی پتانسیل ایجاد شده مشخص می‌کنند. به این منظور و به‌طور قراردادی، طیف مرئی را برمی‌گزینند به‌طوری که منفی‌ترین پتانسیل با رنگ سرخ، و مثبت‌ترین آن با رنگ آبی نمایش یابد. رنگ‌های نسبت داده شده به هر نقطه، در مکان‌های هم‌سطح از نظر چگالی الکترون، به‌طور پیوسته میان این دو رنگ



شکل ۲

و براساس علامت و بزرگی انرژی پتانسیل تغییر می‌کند. مقدار انرژی پتانسیل نزدیک به صفر، با رنگ سبز نشان داده می‌شود.

شکل ۲، نقشهٔ انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی را برای چند ذره نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با استفاده از این نقشه‌ها به خوبی می‌توان جهت چگالی یا تراکم الکترون و گشتاور دوقطبی را در مولکول یا ذرهٔ شیمیایی تشخیص داد.

1. Oxtoby, D. W.; Gillis, H.P.; Campion, A. "Principles: Modern chemistry", 6th Ed. 2008.
2. Chang, R. "Chemistry", 10th Ed. 2007.