ملخص

لقد تمت دراسة الشكل و التركيبة الالكترونية وذبذبة الجزيئات لكل من المركبات التالية:

$Cr(CO)_6$ و $Cr(CO)_5pip$ باستخدام الطرق المحوسبة (Hartree-Fock Density Functional Theory) واستخدام Basis sets مختلفة وذلك عن طريق برنامج Gaussian 98.

لقد أعطت Density Functional Theory نتائج جيدة بالنسبة للتركيبة الالكترونية والذبذبات الجزيئية مقارنة مع القيم المخبرية. و باستخدام نفس الطريقة تمت دراسة المركبات $trans\text{-}(CB)(L)Cr(CO)_4$ حيث ان:

$L = CO, PCL_3, PF_3, PH_3$

الهدف من هذه الدراسة هو معرفة تاثير هذه ال Ligands على صفات هذه المركبات مقارنة مع $Cr(CO)_6$. و في هذه الدراسة تبين ان تاثير trans CO على الرابطة Cr-Cl كان هو الأكبر وهذا ناتج عن قدرة CO لتكوين π-back bonding.

أظهرت هذه الدراسة ان تاثير هذه أل Ligands في الشكل ذات الثمانية اوجه المنتظم (Octahedral) مشابه لنفس التاثير في المركبات التي تاخذ الشكل الرباعي المسطح (Square planar). كما واظهرت هذه الدراسة ان القيم المحوسبة لذبذبات الجزيئات في هذه المركبات مشابه للقيم المخبرية لذبذبات نفس الجزيئات.