

En binding eller ikke en binding: Det er spørsmålet

S.Pathak^{1,2}, R.Bast¹, K.Ruud¹

¹Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, University of Tromsø, Tromsø, N-9037, NORWAY

²Raman Center for Atomic, Molecular and Optical Sciences, Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutta 700 032, INDIA

Den kovalente bindingen er et sentralt begrep innen kjemi, og mye av suksessen til kjemi som vitenskap skyldes våre evner til å knytte begrepet om deling av elektronpar til atomers evne til å danne molekyler. Det finnes derfor en meget rik litteratur knyttet til begrepet kjemisk binding og ulike klassifikasjoner av kjemiske bindinger og vekselvirkninger.

Beregningskjemi har gjort det mulig å kvantifisere kjemisk binding. Men den kjemiske bindingen er i seg selv ikke en observerbar størrelse, og det finnes derfor mange ulike teoretiske definisjoner av en kjemisk binding. I dette foredraget vil jeg gi forsøke å gi en kort oversikt over de viktigste metodene som finnes for å karakterisere kjemiske bindinger, med et fokus på kontroversielle resultater som følger av disse ulike definisjonene. Til slutt vil jeg presentere en hypotese fra vårt eget arbeid om hvordan man kan visualisere en kjemisk binding basert på magnetisk felt-induserte elektronstrømmer i et molekyl..

Ved å visualisere disse magnetisk-felt-induserte strømmene i enkle molekyler, så kan vi få en god innsikt i hvordan elektroner strømmer mellom to atomer bundet sammen av en kjemisk binding. Når vi studerer disse ringstrømmene som en funksjon av bindingsavstand, så kan vi også visualisere når de to atomene deler et elektronpar, og når de to atomene utelukkende involverer "egne" elektroner. Dette kan være en ny måte å definere og visualisere en kjemisk binding på.

¹ J.Jusélius, D.Sundholm, and J.Gauss, J.Chem.Phys. **121**, 3952 (2004).

² R.Bast, J.Jusélius, and T.Saue, Chem.Phys. **356**, 187 (2009).

