

به نام خدا

جابجایی شیمیایی مستقل از هسته ( NICS ) به عنوان شاخصی برای ارزیابی آروماتیسیته ترکیبات حلقوی آروماتیسیته بعنوان یکی از مفاهیم بسیار مهم و پرکاربرد همواره مورد توجه شیمیدانان بوده است. لذا تعیین مقدار این مفهوم تا اندازه زیادی موضوع تحقیقات اخیر انجام شده در شاخه‌ی شیمی فیزیک آلی است. از ابتدای ورود مفهوم آروماتیسیته به عرصه‌ی شیمی، ۴ ویژگی کلی از ترکیبات، جهت تعیین مقدار این خاصیت مورد توجه قرار گرفته‌اند:

۱- ساختار ترکیب      ۲- انرژی ترکیب      ۳- واکنش پذیری      ۴- ویژگیهای مغناطیسی

که در این میان ویژگیهای مغناطیسی ترکیب برای اندازه گیری دقیق آروماتیسیته بیش از سایر موارد کاربرد دارد.

جابجایی شیمیایی مستقل از هسته یا NICS در سال 1996 توسط Schleyer پیشنهاد شده است و یکی از روشهایی است که برای اندازه گیری آروماتیسیته سیستم بر اساس ویژگی مغناطیسی ترکیب می باشد. از زمان معرفی، این شاخص به طور گسترده برای شناسایی و اندازه گیری آروماتیسیته و آنتی آروماتیسیته ترکیبات، به کار برده شده است.

مبنای سنجش NICS در نقاط مختلف حلقه، جریان حلقه است که توسط الکترونهاي غير مستقر در يك ميدان مغناطیسی ایجاد می شود. مقادیر منفی NICS آروماتیک بودن ترکیب را نشان میدهد، مقادیر نزدیک به صفر و صفر غیر آروماتیک بودن ترکیب و مقادیر مثبت به آنتی آروماتیک بودن ترکیب اشاره دارد. از جمله مزایای این تکنیک :

۱- نیاز به استانداردهای مرجع ندارد

۲- وابستگی ناچیزی به سائز حلقه نشان می دهد ولی به تعداد الکترونهاي  $\pi$  وابسته است

۳- در چندین مولکول NICS با دیگر شاخص های آروماتیسیته بر پایه انرژی، هندسه فضایی، و دیگر معیارهای مغناطیسی همبستگی خوبی دارد.

۴- NICS با استفاده از برنامه های محاسباتی شیمی کوانتوم از قبیل Gaussian به آسانی قابل محاسبه است در این سمینار به معرفی NICS به عنوان یک تکنیک برتر در اندازه گیری کمی آروماتیسیته و آنتی آروماتیسیته ترکیبات پرداخته می شود و سپس به موارد زیر پرداخته می شود:

۱-  $\sigma$ -Aromaticity and  $\sigma$ -Antiaromaticity

۲- Aromaticity in Metal Clusters

۳- A Computational NICS Characterization of  $C_{60-n}Si_n$  Heterofullerenes

۴- بررسی آروماتیسیته در  $\pi$ -extended tetraoxa[8]circulenes