

### Definición IUPAC:

Un orbital natural de enlace (NBO) es aquel formado a partir de orbitales naturales híbridos (NHO). Por ejemplo, para un orbital  $\sigma$  localizado entre los átomos A y B, el NBO es:

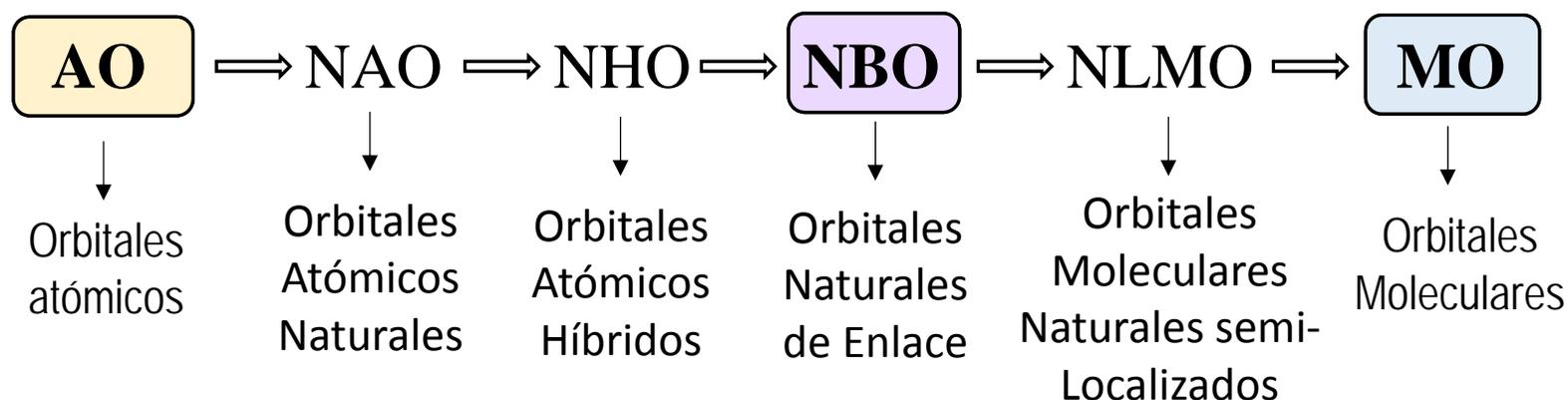
$$\sigma_{AB} = c_A h_A + c_B h_B$$

donde  $h_A$  y  $h_B$  son los NHO centrados en los átomos A y B, respectivamente.

Los NBOs corresponden a enlaces localizados y pares libres como unidades básicas de la estructura molecular. De este modo es posible interpretar convenientemente las funciones de onda ab-initio en términos de los conceptos clásicos de estructuras de Lewis, transformando dichas funciones de onda en NBOs.

El concepto de orbital natural fue introducido por primera vez por Per-Olov Löwdin, en 1955, para describir un conjunto único de funciones uni-electrónicas orto-normales, que son inherentes a la función de onda N-electrónica.

Los NBOs se pueden considerar como un paso intermedio en la transformación de orbitales atómicos (AO) a orbitales moleculares (MO):



Los NBOs tienen un carácter de máxima ocupación, en regiones localizadas en 1 y dos centros de la molécula. De modo que los incluyen el máximo posible de densidad electrónica, idealmente con un valor cercano a 2.00. Esto hace que se correspondan a la función de onda de la estructura de Lewis mas exacta posible.

Se considera que un alto porcentaje de densidad electrónica (frecuentemente >99%, para moléculas orgánicas) se corresponde a una estructura de Lewis natural exacta.

## Natural Bond Orbitals (NBO)

La expresión:  $\sigma_{AB} = c_A h_A + c_B h_B$

Se corresponde a la formación de un orbital  $\sigma$  enlazante, formado directamente a partir de orbitales híbridos de valencia, centrados en los átomos que forman el enlace (A y B). Por su parte  $c_A$  y  $c_B$  se conocen como coeficientes de polarización. Los valores de estos coeficientes indican la naturaleza del enlace, que puede variar desde el límite covalente ( $c_A = c_B$ ) hasta el límite iónico ( $c_A \gg c_B$ ).

Por cada orbital  $\sigma$  enlazante existe el correspondiente orbital antienlazante ( $\sigma^*$ ) necesario para completar el espacio de valencia. Este se obtiene como:

$$\sigma_{AB}^* = c_A h_A - c_B h_B$$

En el marco NBO a los orbitales enlazantes se les conoce como “Lewis orbitals” y se caracterizan por tener un número de ocupación cercano a 2.00, mientras que a los orbitales antienlazantes se les conoce como “non-Lewis orbitals” y se caracterizan por tener un número de ocupación cercano a 0.00.

Números de ocupación 2.00 y 0.00 para todos los orbitales Lewis y no-Lewis, respectivamente, se corresponden a una estructura de Lewis ideal. Números de ocupación se alejan de estos valores límites indican la presencia de “efectos de delocalización” y una estructura que se aleja de la de Lewis.

Aunque los orbitales Hartree-Fock (o Kohn-Sham) por definición conforman la mejor función de onda (o densidad electrónica) mono-configuracional posible, los NBOs también son útiles para describir orbitales de sistemas químicos.

Esto se debe a que los NBOs permiten obtener información directamente relacionada con el enlace químico y una interpretación en línea con los conceptos clásicos de enlace en química orgánica (estructuras de Lewis, enlaces, pares libres, hibridación, delocalización, etc).

Los NBOs son orbitales localizados, con número máximo de ocupación, lo que permite describir la densidad electrónica y otras propiedades de los sistemas químicos con el menor número posible de orbitales ocupados. Esto, además, facilita la convergencia de los cálculos.

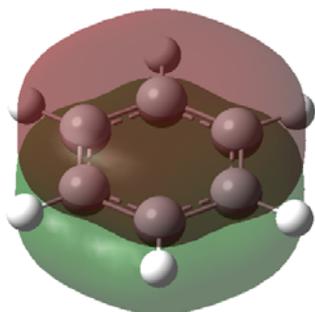
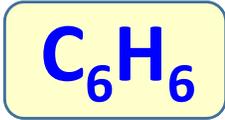
Los NBO se clasifican en orbitales inter internos (core), de enlace (bonding), de anti-enlace (anti-bonding) y Rydberg'' (el resto, generalmente con número cuántico principal mayor al de los orbitales ocupados de mayor energía).

Ejemplos de propiedades que se pueden calcular usando bases NBO:

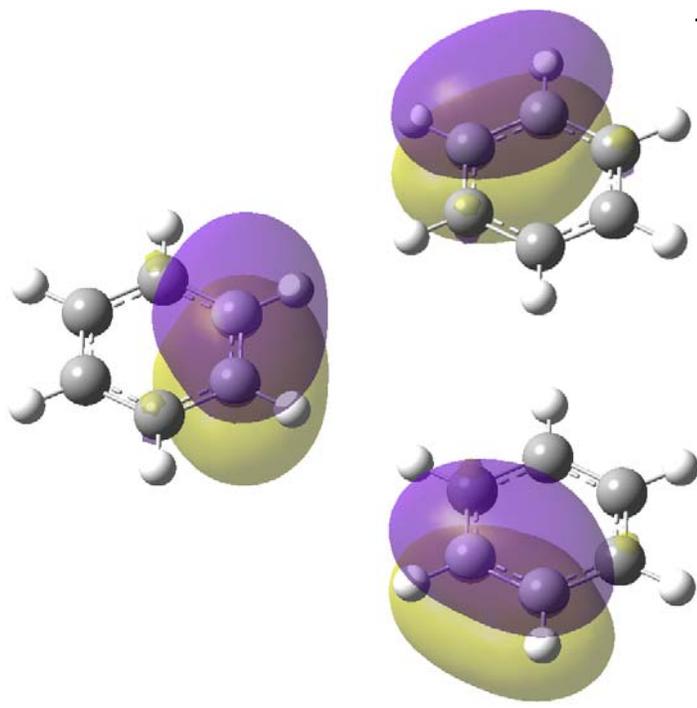
- cargas atómicas,
- polarizabilidad,
- órdenes de enlace,
- hibridación,
- interacciones orbitales enlace-anti-enlace,
- estructuras de resonancia,
- descomposición de energía,
- etc.

Diferencias entre NBOs y MOs:

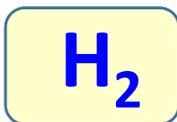
- Los MOs están delocalizados en toda la molécula, mientras que los NBOs están localizados sobre los átomos o los pares de átomos enlazados.
- La forma de los MOs no siempre se parece a la de pares libres, enlaces  $\sigma$  y  $\pi$ , por lo que el uso de NBOs facilita el razonamiento químico clásico.
- Las representaciones de MO permiten describir mejor estructuras químicas con alto grado de delocalización electrónica (por ejemplo benceno), mientras que los NBOs en estos casos se corresponden a las estructuras de resonancia.
- Para visualizar orbitales en GausView se necesitan los archivos .fchk en ambos casos. La opción implícita de Gaussian es guardar en los archivos .chk los OM, si se quieren los NBO es necesario agregar la palabra clave: `pop=(nbo,savenbo)`.



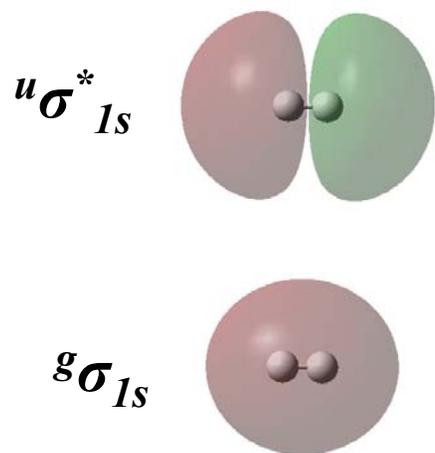
**MO:** un orbital enlazante  $\pi$  que representa la delocalización electrónica sobre toda la molécula (6 centros).



**NBO:** tres orbitales  $\pi$  enlazantes, cada uno se corresponde a un enlace (2 centros), en su conjunto se corresponden al MO mostrado arriba.



**MO**



**NBO**



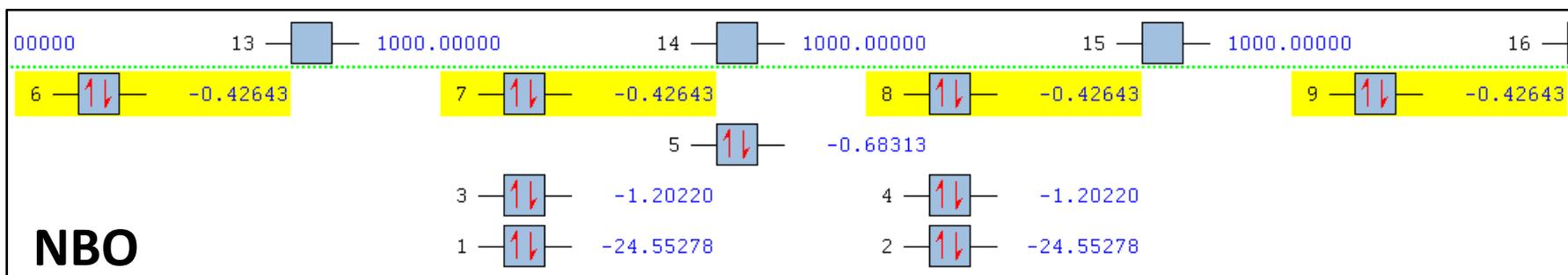
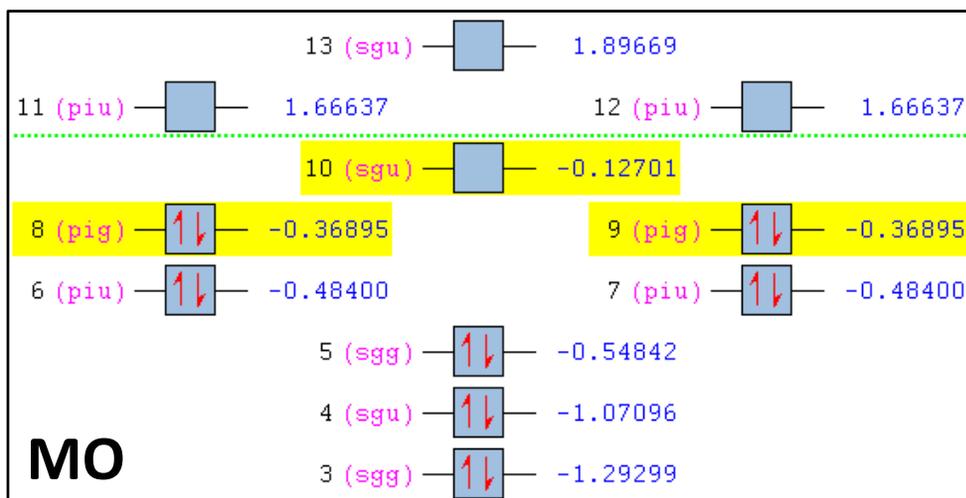
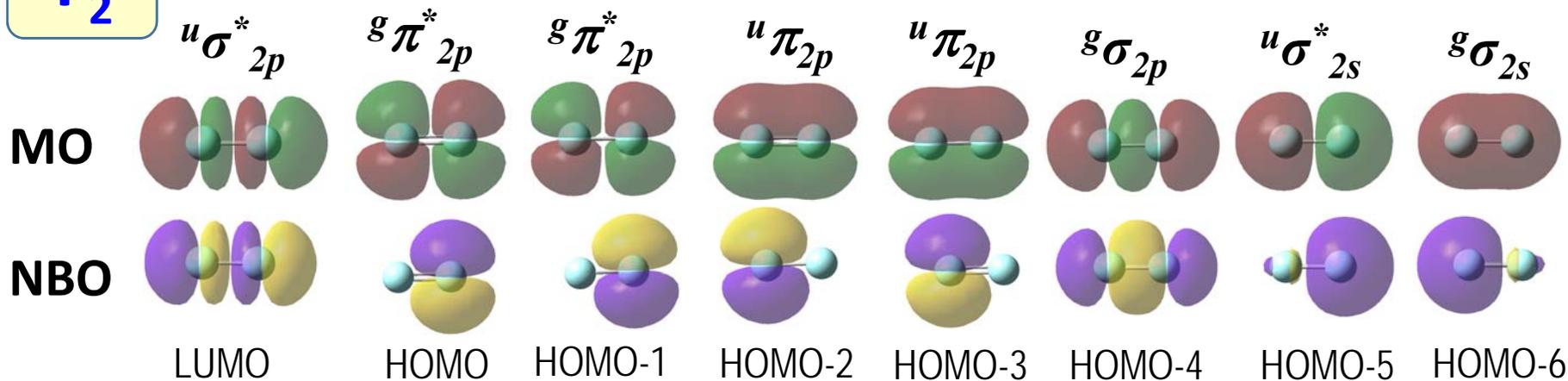
LUMO

HOMO

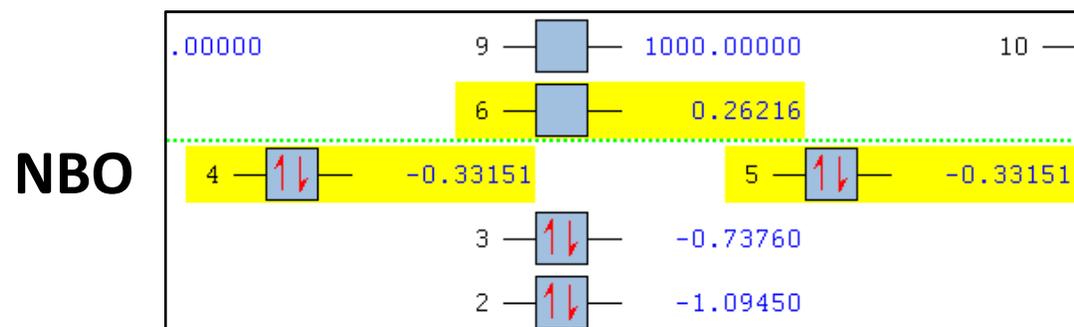
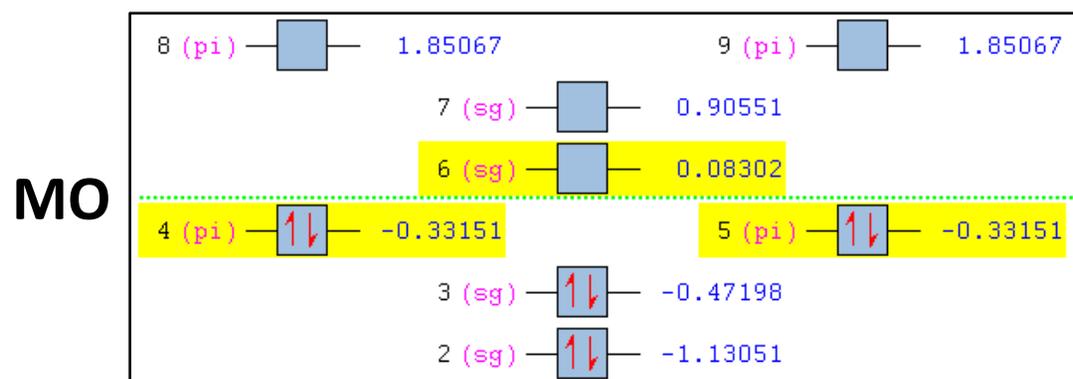
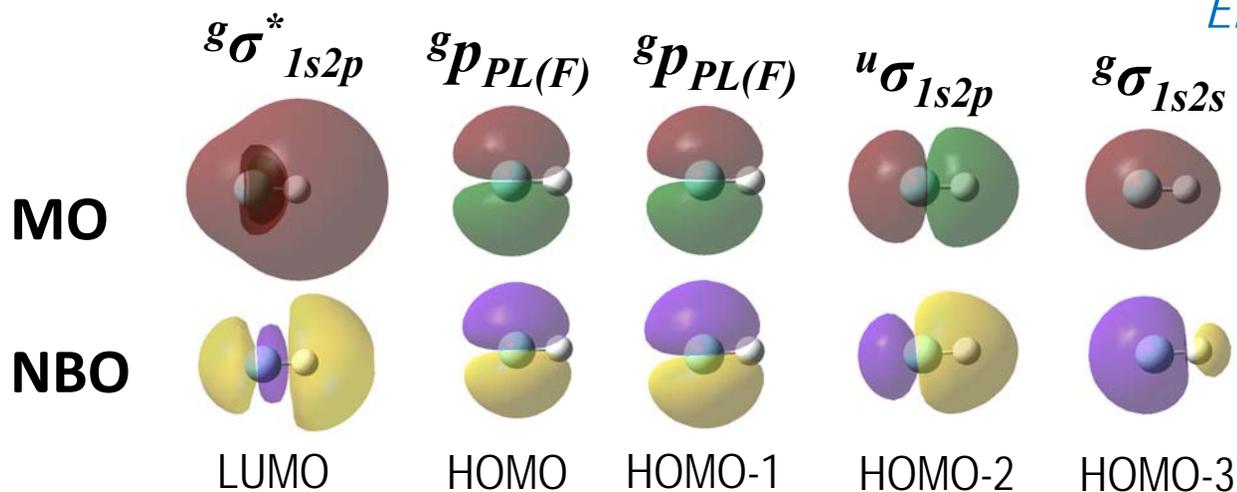
Energías orbitales

4 (sgu)	□	1.21945
3 (sgg)	□	0.71261
2 (sgu)	□	0.11695
1 (sgg)	↑↓	-0.42871

4	□	1000.00000
3	□	0.86112
2	□	0.32677
1	↑↓	-0.42871

**F<sub>2</sub>***Enlace Químico*

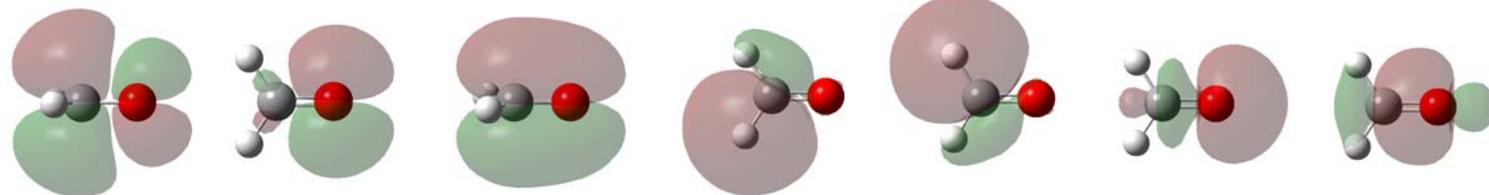
HF



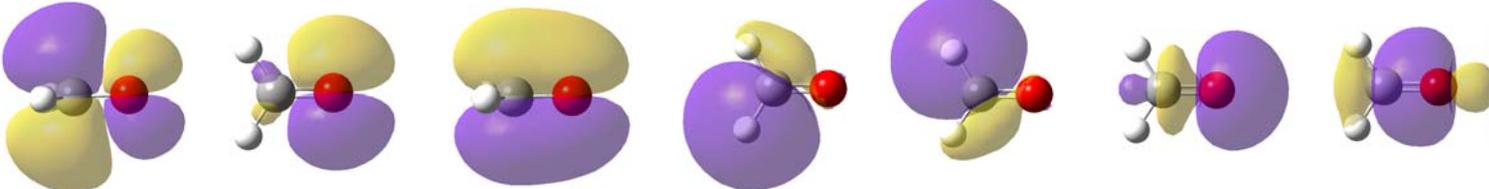
**CH<sub>2</sub>O**

*Enlace Químico*

**MO**



**NBO**



LUMO

HOMO

HOMO-1

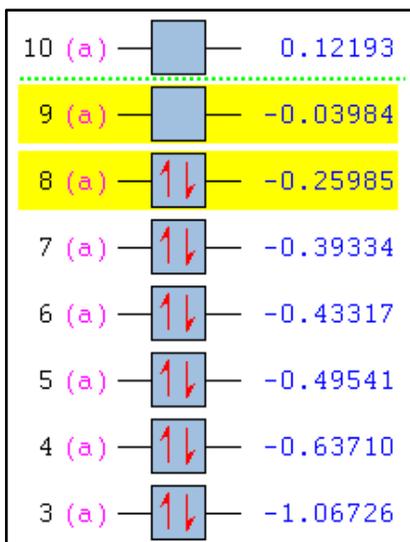
HOMO-2

HOMO-3

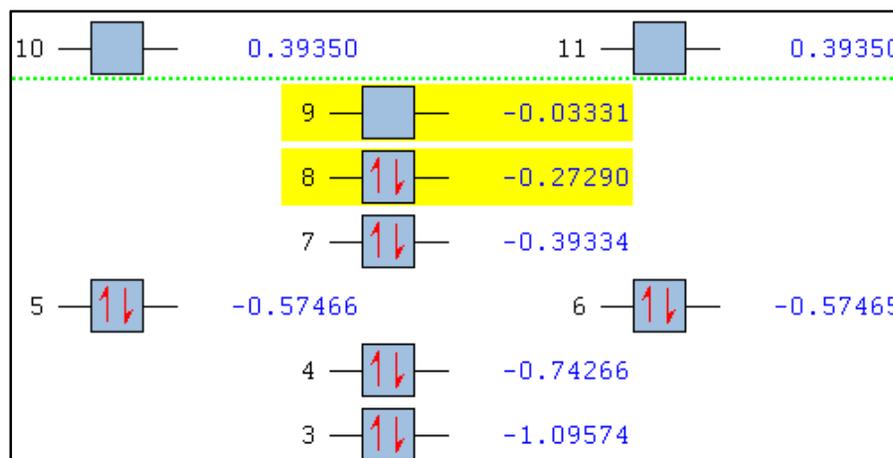
HOMO-4

HOMO-5

**MO**



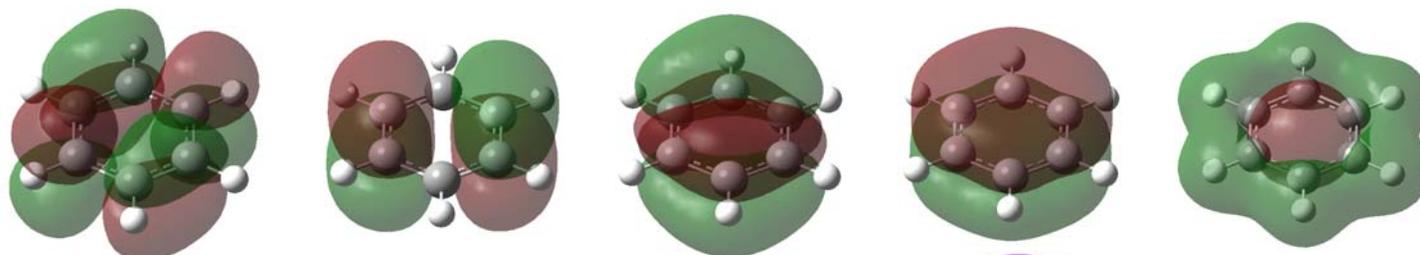
**NBO**



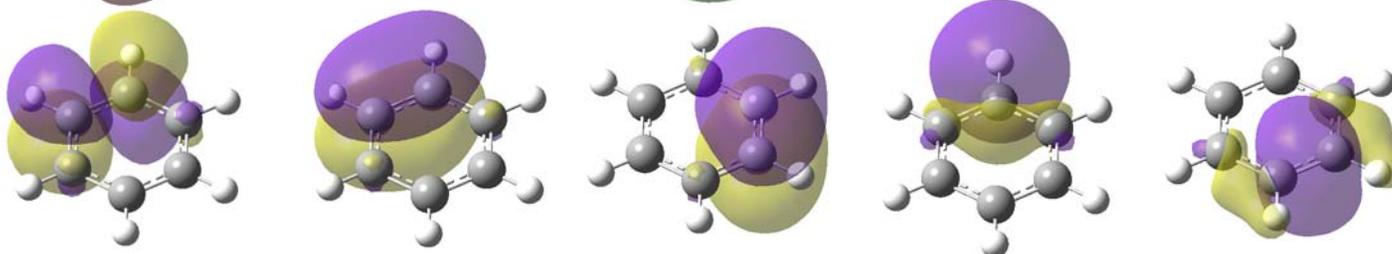


*Enlace Químico*

**MO**



**NBO**



LUMO

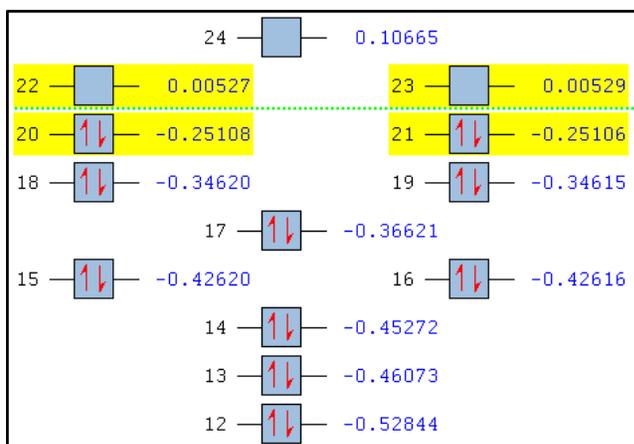
HOMO

HOMO-1

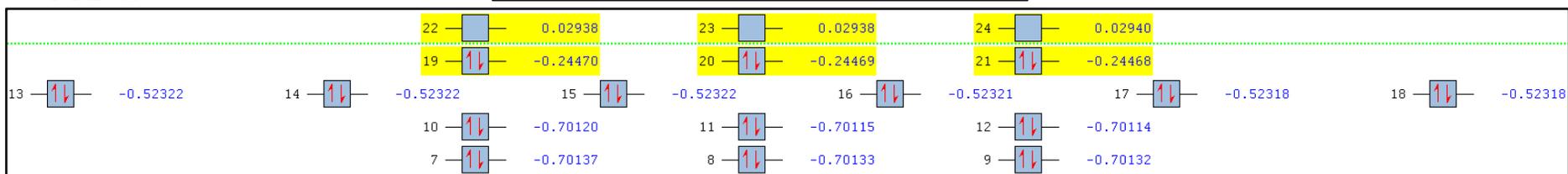
HOMO-4

HOMO-9

**MO**



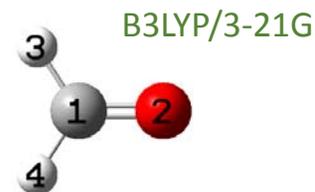
**NBO**



# Natural Bond Orbitals (NBO)

Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

```
*****Gaussian NBO Version 3.1*****  
N A T U R A L   A T O M I C   O R B I T A L   A N D  
N A T U R A L   B O N D   O R B I T A L   A N A L Y S I S  
*****Gaussian NBO Version 3.1*****
```



NATURAL POPULATIONS: Natural atomic orbital occupancies

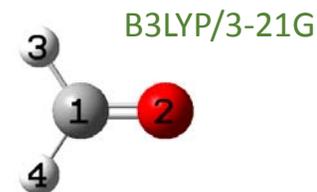
NAO	Atom	No	lang	Type (AO)	Occupancy	Energy
1	C	1	S	Cor( 1S)	1.99928	-10.11404
2	C	1	S	Val( 2S)	1.06720	-0.31179
3	C	1	S	Ryd( 3S)	0.00390	1.26481
4	C	1	px	Val( 2p)	0.82473	-0.04142
5	C	1	px	Ryd( 3p)	0.01584	0.67319
6	C	1	py	Val( 2p)	1.16636	-0.09033
7	C	1	py	Ryd( 3p)	0.00156	0.80424
8	C	1	pz	Val( 2p)	0.78137	-0.16712
9	C	1	pz	Ryd( 3p)	0.00267	0.66582
10	O	2	S	Cor( 1S)	1.99969	-18.74954
11	O	2	S	Val( 2S)	1.73842	-0.98712
12	O	2	S	Ryd( 3S)	0.00065	2.84810
13	O	2	px	Val( 2p)	1.57681	-0.31852
14	O	2	px	Ryd( 3p)	0.00016	1.52485
15	O	2	py	Val( 2p)	1.88527	-0.27286
16	O	2	py	Ryd( 3p)	0.00175	1.59528
17	O	2	pz	Val( 2p)	1.21585	-0.25288
18	O	2	pz	Ryd( 3p)	0.00011	1.48004
19	H	3	S	Val( 1S)	0.85486	-0.00081
20	H	3	S	Ryd( 2S)	0.00433	0.71460
21	H	4	S	Val( 1S)	0.85486	-0.00081
22	H	4	S	Ryd( 2S)	0.00433	0.71460

Para cada una de las funciones NAO se muestra: el átomo sobre el cual está centrada, el momento angular (lang), el tipo de orbital, la ocupación y la energía.

Por ejemplo el NAO 4 está centrado sobre el C, es un orbital px, de valencia, con número de ocupación 0.82473 y energía -0.04142 Hartrees.

## Natural Bond Orbitals (NBO)

Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehido):



Summary of Natural Population Analysis:

Atom	No	Natural Charge	Natural Population			
			Core	Valence	Rydberg	Total
C	1	0.13709	1.99928	3.83966	0.02398	5.86291
O	2	-0.41871	1.99969	6.41635	0.00267	8.41871
H	3	0.14081	0.00000	0.85486	0.00433	0.85919
H	4	0.14081	0.00000	0.85486	0.00433	0.85919
* Total *			3.99897	11.96572	0.03531	16.00000

En el siguiente segmento se muestran las cargas atómicas naturales (carga nuclear menos la población natural sobre el átomo) y las poblaciones sobre cada tipo de orbital (core, valence, Rydberg) y la total.

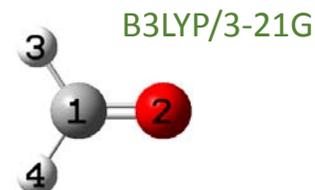
Por ejemplo, sobre el O la carga es -0.41871, tiene aprox. 2 electrones internos (core), 6.61635 electrones en la capa de valencia y 0.00267 en orbitales Rydberg.

La carga total se corresponde a la de la especie poliatómica, en este caso es cero.

## Natural Bond Orbitals (NBO)

Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehido):

Natural Population	
Core	3.99897 ( 99.9742% of 4)
Valence	11.96572 ( 99.7144% of 12)
Natural Minimal Basis	15.96469 ( 99.7793% of 16)
Natural Rydberg Basis	0.03531 ( 0.2207% of 16)



Porcentaje de contribución de electrones en orbitales naturales a la distribución de carga molecular. En este caso 99.7793 %.

Atom	No	Natural Electron Configuration
C	1	[core]2s( 1.07)2p( 2.77)3p( 0.02)
O	2	[core]2s( 1.74)2p( 4.68)
H	3	1s( 0.85)
H	4	1s( 0.85)

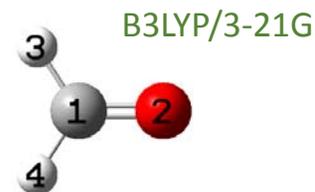
Aunque los números de ocupación de los orbitales atómicos son no enteros en el entorno molecular, las configuraciones electrónicas correspondientes a estados atómicos idealizados "promovidos" se puede aproximar. Con promovidos nos referimos a estados excitados de baja energía necesarios para la formación de enlace. Por ejemplo para el átomo de carbono esta sería  $1s^2$  (core)  $2s^1 2p^3$ .

## Natural Bond Orbitals (NBO)

Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

### NATURAL BOND ORBITAL ANALYSIS:

Cycle	Occ. Thresh.	Occupancies		Lewis Structure				Low occ (L)	High occ (NL)	Dev
		Lewis	Non-Lewis	CR	BD	3C	LP			
1(1)	1.90	15.33174	0.66826	2	5	0	1	2	1	0.07
2(2)	1.90	15.33174	0.66826	2	5	0	1	2	1	0.07
3(1)	1.80	15.86617	0.13383	2	4	0	2	0	0	0.07



Resultados de la búsqueda de una estructura de Lewis NBO

Structure accepted: No low occupancy Lewis orbitals

Se reporta la información por ciclo de búsqueda (en este caso 3). Esta incluye el umbral de ocupación, las poblaciones en NBOs tipo Lewis y no-Lewis, el número de NBOs internos (CR), de enlace de 2 centros (BD), de enlace de 3-centros (3C), y pares libres (LP), así como el número de ocupación en orbitales Lewis (L) y no-Lewis (NL), y finalmente la desviación máxima con respecto a los órdenes formales de enlace. La estructura de Lewis se acepta si todos los orbitales de Lewis tienen número de ocupación superior al umbral.

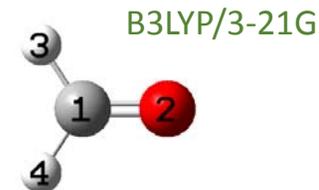
Core	3.99897 ( 99.974% of 4)
Valence Lewis	11.86720 ( 98.893% of 12)
=====	
Total Lewis	15.86617 ( 99.164% of 16)
-----	
Valence non-Lewis	0.11217 ( 0.701% of 16)
Rydberg non-Lewis	0.02166 ( 0.135% of 16)
=====	
Total non-Lewis	0.13383 ( 0.836% of 16)

Estima en forma de porcentaje que tan buena es la descripción de la estructura como natural de Lewis (99.164 %).

También muestra la importancia relativa de los orbitales no-Lewis de valencia y Rydberg.

## Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

(Occupancy)	Bond orbital/	Coefficients/	Hybrids
-----			
1. (2.00000)	BD ( 1) C 1 - O 2		
( 39.20%)	0.6261* C	1 s ( 0.00%) p 1.00 (100.00%)	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000	
		0.0000 0.0000 0.9983 -0.0584	
( 60.80%)	0.7797* O	2 s ( 0.00%) p 1.00 (100.00%)	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000	
		0.0000 0.0000 1.0000 0.0097	
2. (1.99989)	BD ( 2) C 1 - O 2		
( 33.59%)	0.5796* C	1 s ( 30.53%) p 2.28 ( 69.47%)	
		0.0001 0.5497 0.0556 0.8263 0.1093	
		0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000	
( 66.41%)	0.8149* O	2 s ( 37.83%) p 1.64 ( 62.17%)	
		0.0000 0.6148 0.0186 -0.7884 0.0062	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0000	



Información fundamental para cada NBO

Para cada NBO en la primera línea el primer número es la ocupación (entre 0 y 2); sigue una etiqueta que indica el tipo de orbital (BD: enlace de 2 centros, CR: par libre 1 centro, RY\*: Rydberg 1 centro, BD\*: antienlace 2 centros. En este caso el símbolo \* indica NBO no-Lewis. El número entre paréntesis se refiere a si el enlace es simple (1), doble (2)... Luego aparecen los átomos que participan en el NBO. Por ejemplo el NBO 1 es un orbital de enlace simple de 2 centros (C1,O2) con ocupación igual a 2. O sea el enlace  $\sigma$  C-O.

Las siguientes líneas resumen las características de los NHO a partir de los cuales se formó el NBO. Entre paréntesis aparecen las contribuciones porcentuales de cada híbrido, los siguientes números son los coeficientes de polarización, el átomo involucrado, y la composición del híbrido. Por ejemplo el NBO 2 se formó a partir de un orbital híbrido  $sp^{2.28}$  del C (carácter 30.53 % s y 69.47 % p) y un orbital híbrido  $sp^{1.64}$  del O (carácter 37.83 % s y 62.17 % p):

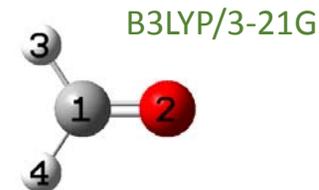
$$\pi_{CO} = 0.5796(sp^{2.28})C + 0.8149(sp^{1.64})O$$

El mayor coeficiente le corresponde al átomo más electronegativo

# Natural Bond Orbitals (NBO)

Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

(Occupancy)	Bond orbital/	Coefficients/	Hybrids
-----			
1. (2.00000)	BD ( 1) C 1 - O 2		
( 39.20%)	0.6261* C	1 s ( 0.00%) p 1.00 (100.00%)	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000	
		0.0000 0.0000 0.9983 -0.0584	
( 60.80%)	0.7797* O	2 s ( 0.00%) p 1.00 (100.00%)	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000	
		0.0000 0.0000 1.0000 0.0097	
2. (1.99989)	BD ( 2) C 1 - O 2		
( 33.59%)	0.5796* C	1 s ( 30.53%) p 2.28 ( 69.47%)	
		0.0001 0.5497 0.0556 0.8263 0.1093	
		0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000	
( 66.41%)	0.8149* O	2 s ( 37.83%) p 1.64 ( 62.17%)	
		0.0000 0.6148 0.0186 -0.7884 0.0062	
		0.0000 0.0000 0.0000 0.0000	



Información fundamental para cada NBO

El resto de los números son los coeficientes usados para obtener los NHOs como combinación lineal de NAOs. El orden en que aparecen es el mismo que en la tabla de NAOs. Por ejemplo el NHO del C usado para obtener el NBO 1 es igual al NAO 8:

$$h_C = 0.9983NAO^{(8)} - 0.0584NAO^{(9)}$$

$$h_C = 0.9983(2p_z)C$$

Mientras que el NHO del C usado para obtener el NBO 2 se obtuvo como:

$$h_C = 0.8263NAO^{(4)} + 0.5497NAO^{(2)}$$

$$h_C = 0.8263(2p_x)C + 0.5497(2s)C$$

En términos de electrones de valencia

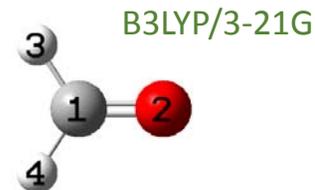
NAO	Atom	No	lang	Type (AO)	Occupancy
1	C	1	s	Cor ( 1s)	1.99928
2	C	1	s	Val ( 2s)	1.06720
3	C	1	s	Ryd ( 3s)	0.00390
4	C	1	px	Val ( 2p)	0.82473
5	C	1	px	Ryd ( 3p)	0.01584
6	C	1	py	Val ( 2p)	1.16636
7	C	1	py	Ryd ( 3p)	0.00156
8	C	1	pz	Val ( 2p)	0.78137
9	C	1	pz	Ryd ( 3p)	0.00267

# Natural Bond Orbitals (NBO)

## Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

NBO Directionality and "Bond Bending" (deviations from line of nuclear centers)

[Thresholds for printing: angular deviation > 1.0 degree]  
 hybrid p-character > 25.0%  
 orbital occupancy > 0.10e



NBO	Line of Centers			Hybrid 1			Hybrid 2		
	Theta	Phi	Dev	Theta	Phi	Dev	Theta	Phi	Dev
1. BD ( 1) C 1 - O 2	90.0	0.0	0.0	0.0	0.0	90.0	0.0	0.0	90.0
3. BD ( 1) C 1 - H 3	90.0	123.1	90.0	118.9	4.2	--	--	--	--
4. BD ( 1) C 1 - H 4	90.0	236.9	90.0	241.1	4.2	--	--	--	--
7. LP ( 1) O 2	--	--	90.0	0.0	--	--	--	--	--
8. LP ( 2) O 2	--	--	90.0	90.0	--	--	--	--	--

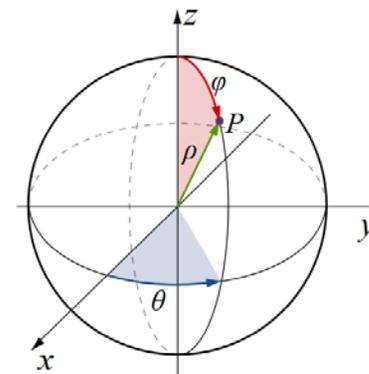
Propiedades  
angulares de los  
NHO

La dirección de los NHO se describe en términos de ángulos polares (theta) y azimutales (phi).

La dirección del NHO se compara con la de la línea que une a 2 núcleos para estimar la desviación (Dev) entre ambas.

Por ejemplo el NHO del C en el enlace  $\sigma$  C-H(3) está desviado de la línea que une a los centros C y H(3) en 4.2 grados, mientras que el NHO del H(3) está alineado.

La mayor desviación es para el enlace CO, en este caso ambos NHO (el del C y el del O) están a 90 grados de la línea internuclear (enlace  $\pi$ ).



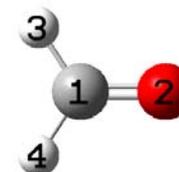
## Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehído):

Second Order Perturbation Theory Analysis of Fock Matrix in NBO Basis

B3LYP/3-21G

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.
within unit 1				
2. BD ( 2) C 1 - O 2	/ 9. RY*( 1) C 1	1.50	1.76	0.046
3. BD ( 1) C 1 - H 3	/ 13. RY*( 1) O 2	1.11	2.17	0.044
4. BD ( 1) C 1 - H 4	/ 13. RY*( 1) O 2	1.11	2.17	0.044
5. CR ( 1) C 1	/ 17. RY*( 1) H 3	1.60	10.82	0.118
5. CR ( 1) C 1	/ 18. RY*( 1) H 4	1.60	10.82	0.118
6. CR ( 1) O 2	/ 9. RY*( 1) C 1	7.11	19.42	0.332
6. CR ( 1) O 2	/ 14. RY*( 2) O 2	0.80	20.28	0.113
7. LP ( 1) O 2	/ 9. RY*( 1) C 1	11.57	1.41	0.114
7. LP ( 1) O 2	/ 21. BD*( 1) C 1 - H 3	0.57	1.14	0.023
7. LP ( 1) O 2	/ 22. BD*( 1) C 1 - H 4	0.57	1.14	0.023
8. LP ( 2) O 2	/ 21. BD*( 1) C 1 - H 3	19.75	0.67	0.104
8. LP ( 2) O 2	/ 22. BD*( 1) C 1 - H 4	19.75	0.67	0.104



Interacciones  
"donor-acceptor"  
(enlace-  
antienlace)

Se lleva a cabo examinando todas las posibles interacciones entre NBOs "lentos" (tipo Lewis) y "vacíos" (tipo no-Lewis) y estimando su importancia energética mediante el método perturbativo de segundo orden. Estas interacciones se conocen como correcciones de "delocalización" de orden cero a las estructuras de Lewis. Esto es porque conducen a la pérdida de ocupación en los NBOs "lentos" y a la ganancia de electrones en los orbitales "vacíos" (y por tanto a la desviación de estructuras ideales de Lewis).

Para cada par donador NBO(i) - aceptor NBO(j) la energía de estabilización, E(2), asociada a la "delocalización" se estima como:

$$E(2) = \Delta E_{ij} = \frac{q_i}{F_{ij}^2 (\epsilon_j - \epsilon_i)}$$

donde  $q_i$  es la ocupación de NBO(i),  $\epsilon$  es la energía del orbital y  $F_{ij}$  es el elemento no diagonal de la matriz de Fock NBO

En el ejemplo la mayor estabilización se debe a las interacciones de los pares libres del O con los enlaces  $\sigma$  C-H(3) y C-H(4)

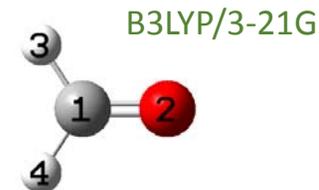
# Natural Bond Orbitals (NBO)

## Interpretación de resultados obtenidos con Gaussian (ejemplo formaldehido):

Natural Bond Orbitals (Summary):

NBO	Occupancy	Energy	Principal Delocalizations (geminal, vicinal, remote)
Molecular unit 1 (CH2O)			
1. BD ( 1) C 1 - O 2	2.00000	-0.39334	
2. BD ( 2) C 1 - O 2	1.99989	-1.09574	9 (g)
3. BD ( 1) C 1 - H 3	1.99713	-0.57465	13 (v)
4. BD ( 1) C 1 - H 4	1.99713	-0.57466	13 (v)
5. CR ( 1) C 1	1.99928	-10.11378	17 (v), 18 (v)
6. CR ( 1) O 2	1.99969	-18.75081	9 (v), 14 (g)
7. LP ( 1) O 2	1.98778	-0.74266	9 (v), 21 (v), 22 (v)
8. LP ( 2) O 2	1.88528	-0.27290	22 (v), 21 (v)
9. RY*( 1) C 1	0.00929	0.66515	
10. RY*( 2) C 1	0.00152	0.80447	
11. RY*( 3) C 1	0.00001	1.23952	
12. RY*( 4) C 1	0.00000	0.67314	
13. RY*( 1) O 2	0.00174	1.59531	
14. RY*( 2) O 2	0.00011	1.52846	
15. RY*( 3) O 2	0.00000	2.84089	
16. RY*( 4) O 2	0.00000	1.47935	
17. RY*( 1) H 3	0.00450	0.70701	
18. RY*( 1) H 4	0.00450	0.70701	
19. BD*( 1) C 1 - O 2	0.00000	-0.03331	
20. BD*( 2) C 1 - O 2	0.00012	0.50279	
21. BD*( 1) C 1 - H 3	0.05602	0.39350	
22. BD*( 1) C 1 - H 4	0.05602	0.39350	
-----			
Total Lewis	15.86617	( 99.1636%)	
Valence non-Lewis	0.11217	( 0.7010%)	
Rydberg non-Lewis	0.02166	( 0.1354%)	
-----			
Total unit 1	16.00000	(100.0000%)	
Charge unit 1	0.00000		

El resumen al final de la tabla muestra que los NBO tipo Lewis (1-8) describen el 99.1636 % de la densidad electrónica total.



Resumen condensado que permite identificar rápidamente los orbitales aceptores delocalizantes principales, asociados a cada NBO donador.

Y la relación topológica entre ellos:

- geminal (g): NBO donador y NBO aceptor sobre el mismo átomo.
- vecinal (v): NBO donador y NBO aceptor sobre átomos vecinos (enlazados, adyacentes).
- remota (r): NBO donador y NBO aceptor sobre átomos no enlazados.

En el ejemplo uno de los pares libres del O es el que presenta la menor ocupación (1.88528) y la mayor energía (-0.27290) de los orbitales ocupados y se encuentra principalmente delocalizado en los NBO 22 y 21 que se corresponden a NBOs de antienlace  $\sigma$  C-H.

### **Bibliografía :**

- Glendening ED, Landis CR, Weinhold F “Natural Bond Orbital Methods” *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2012**, 2, 1–42.
- Weinhold F, Landis CR “Natural Bond Orbitals and Extensions of Localized Bonding Concepts” *Chem. Educ. Res. Pract.* **2001**, 2, 91-104.
- Reed AE, Curtiss LA, Weinhold F “Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint” *Chem. Rev.* **1988**, 88, 899-926.
- Weinhold F, Landis CR. “Discovering Chemistry With Natural Bond Orbitals” (2012) New Jersey: John Wiley & Sons. pp. 132–133.



## Ejercicios

1. Realice los cálculos necesarios, con el paquete de programas Gaussian09 y nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p), para hacer el análisis de NBO de las siguientes moléculas:

- a) etano
- b) ácido fórmico
- c) fenol

Discuta los resultados incluyendo la formulación de cada NBO y cada NHO, el peso en porcentaje de las estructuras de Lewis y las mayores contribuciones a la energía de delocalización.

2. Realice los cálculos necesarios, con el paquete de programas Gaussian09 y nivel de teoría B3LYP/6-311++G(d,p), para hacer el análisis de NBO de su molécula de trabajo.

Discuta los resultados incluyendo la formulación de cada NBO y cada NHO, el peso en porcentaje de las estructuras de Lewis y las mayores contribuciones a la energía de delocalización.