

دراسة طيفية لتأثير الرزونانس في صفة الأصرة المزدوجة للكاربونيل في قواعد شف اليوريا ذات النظام المتعاقب

عبدالله حسين كشاش* محمد عدي عزت** زياد خضر عبد الرزاق*

استلام البحث 19، نيسان، 2010
قبول النشر 13، شباط، 2011

الخلاصة :

تضمن البحث تحضير عدد من قواعد شف بتكاثف اليوريا مع البنزليدهايد او احد مشتقاته (البرومو بنزليدهايد او الهيدروكسي بنزليدهايد) بنسبة (1 : 1) مول (يوريا : بنزليدهايد او احد معوضاته) للحصول على المركبات A1 , B1 , C1 , D1 , E1 , F1 , G1 وبنسبة (2 : 1) مول (يوريا : بنزليدهايد او احد معوضاته) للحصول على المركبات A2 , B2 , C2 , D2 , E2 , F2 , G2 تم تشخيص المركبات المحضرة بطيف الاشعة تحت الحمراء FT-IR وتقنية كروموتوكرافيا الطبقة الرقيقة . تم حساب ثابت قوة الاصرة K لمجموعة الكاربونيل من العدد الموجي لامتطاط مجموعة الكاربونيل الظاهر في اطياف الاشعة تحت الحمراء للمركبات المحضرة وباستخدام المعادلة الآتية :

$$K = 4\pi^2 C^2 v'^2 \mu$$

كما تم تحديد التغير في رتبة الاصرة المزدوجة لمجموعة الكاربونيل نسبة الى دراسات سابقة وذلك بمقارنة ثوابت قوة الاصرة التي تم الحصول عليها من طيف الاشعة تحت الحمراء بثوابت القوة المنشورة في الادبيات ومن ثم حساب رتبة الاصرة للمركبات المحضرة من خلال رسم معطيات البحوث السابقة بيانيا واستخراج معادلة المنحني ومن ثم حساب رتبة الاصرة من معادلة المنحني لكاربونيل المركبات المحضرة .

الكلمات المفتاحية : صفة الأصرة المزدوجة لكاربونيل اليوريا .

المقدمة :

الأصرة (K)
في سنة 2003 تمكن Enrique J. Baran من حساب الاتساع الاهتزازي الرئيس لعدد من جزيئات الهالوجين المتجانس وغير المتجانس من خلال حساب ثابت قوة الاصرة باستخدام المعادلة 2 في منطقة الاشعة تحت الحمراء [2] كما تمكن E.A. Robinson وبالاعتماد على دراسات سبقته في هذا المجال من ايجاد علاقة خطية بين ثابت قوة الاصرة ورتبتها لعدد من الجزيئات [3] إذ أشارت الدراسات الى ان لقيمة الثابت 18.7 dyns.cm⁻¹ رتبة أصرة مساوية الى 3.0 [4] وللثابت 12.1 dyns.cm⁻¹ رتبة أصرة 2.0 [5] اما الثابت 8.2 dyns.cm⁻¹ فكانت رتبة الاصرة مساوية الى 1.33 [6] واخيرا الثابت 9.1 dyns.cm⁻¹ كانت رتبة الاصرة له مساوية الى 1.5 [7] والجدول (1) يوضح بعض ثوابت القوة للاصرة مع رتبتها n في عدد من المركبات المحتوية على التركيب C – O .

تمثل المعادلة الرياضية الآتية والمشتقة من قانون هوك العلاقة بين ثابت قوة الاصرة وتردد الاهتزاز التي لها الصيغة الرياضية الآتية [1]
$$v' = 1/2 \pi C (k / \mu)^{1/2} \dots\dots\dots 1$$

إذ تمثل C سرعة الضوء , v' العدد الموجي للاهتزاز , μ الكتلة المختزلة للمجموعة قيد الدراسة ويمكن حساب ثابت قوة الاصرة من المعادلة (1) بترتيبها لينتج معادلة (2)
$$K = 4\pi^2 C^2 v'^2 \mu \dots\dots\dots 2$$

بعد حساب قيمة k للمركبات المحضرة من المعادلة (2) السابقة بالتعويض عن العدد الموجي للاهتزاز الأمتطاطي الأساس لمجموعة الكاربونيل من طيف الأشعة تحت الحمراء يتم حساب رتبة الاصرة من معادلة المنحني (3) الآتية والتي تم الحصول عليها من رسم المعطيات في دراسات سابقة
$$Y = 6.3252 X - 0.3567 \dots\dots\dots 3$$

إذ يمثل X رتبة الاصرة (n) ويمثل Y ثابت قوة

* كلية التربية للعلوم الصرفة - قسم الكيمياء - جامعة الانبار
** كلية التربية للبنات - قسم الكيمياء - جامعة الانبار

المواد وطرائق العمل :

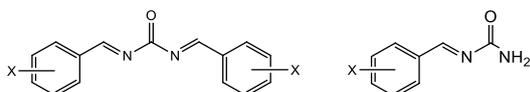
تم تعيين درجات انصهار المركبات المحضرة في جهاز Gallenkamp Melting point Apparatus وتم تشخيص المركبات المحضرة بطيف الأشعة تحت الحمراء على شكل اقراص مع KBr في جهاز FT-IR 100 Fisher company thermo Scintific كما تم تشخيص المركبات المحضرة بتقنية كروماتوغرافيا الطبقة الرقيقة T.L.C باستخدام المذيبات (بنزين : ايثانول : داي اثيل اثير) بنسبة (7 : 1 : 2) وتم تطهيرها باليود .

تحضير 3,1 ثنائي بنزليدين يوريا (او احد مشتقات البنزالديهايد) :

تذاب كمية معينة من اليوريا والبنزالديهايد او احد مشتقاته بنسبة (1 : 1) (يوريا : بنزالديهايد) مول في الميثانول لتحضير المركبات A1 , B1 , G1 , D1 , E1 , F1 , C1 او تذاب في المذيب نفسه بنسبة (2 : 1) (يوريا : بنزالديهايد) مول لتحضير المركبات A2 , B2 , C2 , D2 , E2 , F2 , G2 يصعد المزيج لمدة ساعتين ثم يزال المذيب من مزيج التفاعل بالتبخير وتمت إعادة بلورة الراسب مع الايثانول . والجدول (6) يوضح بعض الصفات الفيزيائية للمركبات المحضرة

النتائج والمناقشة :

تم تحضير قواعد شف من تكاثف اليوريا مع البنزالديهايد بنسبة (1 : 1) و (2 : 1) مول (يوريا : بنزالديهايد او احد مشتقاته) للحصول على التعويض الاحادي او الثنائي لقواعد شف على التوالي والاشكال الآتية تمثل الصيغة العامة للمركبات المحضرة .



والجدول (2) يوضح رموز المركبات المحضرة والمجاميع المعوضة ومواقعها على الحلقة الاروماتية

جدول (2) يوضح رموز المركبات المحضرة والمجاميع المعوضة ومواقعها

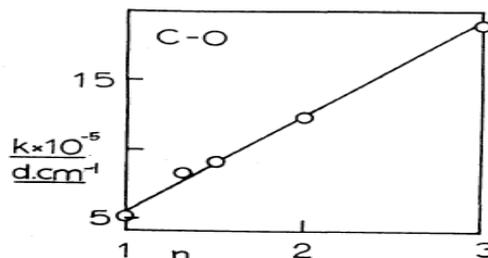
Comp.	A1 , A2	B1 , B2	C1 , C2	D1 , D2	E1 , E2	F1 , F2	G1 , G2
X	-H	Ortho - Br	Meta - Br	Para - Br	Para - OH	Ortho - OH	Meta - OH

تحت الحمراء للمركبات المحضرة كما تم تشخيصها بتقنية كروماتوغرافيا الطبقة الرقيقة باستخدام الصفائح الزجاجية والجدول (4) يوضح قيم سرعة الجريان R_f للمركبات المحضرة.

جدول (1) يوضح قيم ثابت قوة الأصرة ورتبتها في عدد من المركبات

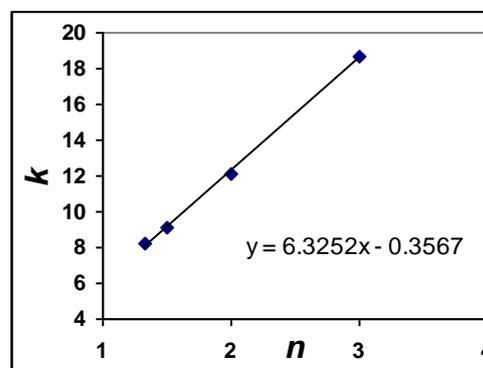
Comp.	$K \cdot 10^{-5} \text{ dyns.cm}^{-1}$	n	Referance
CO	18.7	3.0	4
H ₂ CO	12.1	2.0	5
CO ₃ ⁼	8.2	1.33	6
HCO ₃ ⁼	9.1	1.5	7

كما اشار H.W.Thompson الى ان العلاقة تكون طردية بين ثابت قوة الأصرة ورتبتها [8] ووضح ذلك بالرسم البياني الآتي



شكل (1) يوضح العلاقة الطردية بين رتبة الأصرة وثابت القوة كما جاء في الادبيات [8]

ويرسم ثابت قوة الأصرة C - O مقابل رتبتها للمركبات المذكورة في الجدول (1) تنتج العلاقة الخطية الموضحة في الشكل (2) الآتي ومنها تحسب معادلة المنحني لتطبيقها على المعطيات التي تم الحصول عليها للمركبات المحضرة



شكل (2) يوضح العلاقة الخطية بين ثابت قوة الأصرة C-O ورتبتها لبعض المركبات المنشورة في الادبيات [4 - 7]

أعطت نتائج أطيف الأشعة تحت الحمراء للمركبات المحضرة حزمة مط $\text{CH} = \text{N}$ عند المدى (1625 - 1660) واختفاء حزمة امتصاص الاهتزاز التوسعي لمجموعتي الامين لليوريا والجدول (3) يوضح قيم امتصاص الأشعة

جدول (3) حزم امتصاص الأشعة تحت الحمراء للمركبات المحضرة.

Comp.	ν O-H cm ⁻¹	ν_{as} N-H cm ⁻¹	ν_{sy} N-H cm ⁻¹	ν C-H cm ⁻¹	ν C=O cm ⁻¹	δ NH ₂ cm ⁻¹	ν C=N cm ⁻¹	τ NH ₂ cm ⁻¹	ω NH ₂ cm ⁻¹	ν C-Br cm ⁻¹	ν C-O cm ⁻¹
Urea	X	3461	3360	X	1669	1625	1456	1162	786	X	X
A ₁	X	3448	3362	3060	1674	1624	1454	1179	805	X	X
A ₂	X	X	X	3071	1678	X	1454	X	X	X	X
B ₁	X	3429	3310	3061	1666	1610	1460	1148	751	599	X
B ₂	X	X	X	3071	1653	X	1438	X	X	599	X
C ₁	X	3436	3303	3062	1664	1610	1428	1135	779	604	X
C ₂	X	X	X	3060	1659	X	1429	X	X	610	X
D ₁	X	3445	3346	3064	1678	1600	1464	1150	810	557	X
D ₂	X	X	X	3061	1660	X	1464	X	X	590	X
E ₁	3449	3353	3213	3020	1666	1598	1446	1156	835	X	1238
E ₂	3431	X	X	3020	1668	X	1452	X	X	X	1240
F ₁	3446	3351	3220	3020	1679	1608	1462	1151	835	X	1240
F ₂	3442	X	X	3040	1687	X	1454	X	X	X	1182
G ₁	3445	3345	3216	3040	1670	1581	1463	1151	810	X	1183
G ₂	3445	X	X	3025	1670	X	1443	X	X	X	1172

X = لا توجد حزمة امتصاص في الطيف لعدم وجود مجموعة

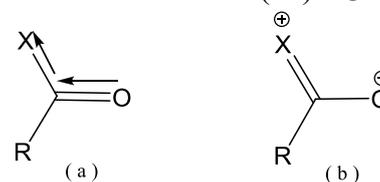
جدول (4) يوضح سرعة الجريان للمركبات المحضرة بمذيب (بنزين:ايثانول: داي اثيل ايثر) بنسبة (2:1:7) وتم تظهيرها باليود

Comp.	A ₁	A ₂	B ₁	B ₂	C ₁	C ₂	D ₁	D ₂	E ₁	E ₂	F ₁	F ₂	G ₁	G ₂
R _f	0.60	0.57	0.56	0.59	0.85	0.59	0.57	0.53	0.55	0.50	0.62	0.65	0.61	0.60

مجموعة الايمين C = N خفضت طول الأصرة وزادت قيمة ثابت الأصرة المزدوجة لمجموعة الكربونيل إذ كان ثابت قوة الأصرة لمجموعة كربونيل اليوريا قبل التفاعل مع البنزالديهيد ثابت القوة 12.81 dyns/cm ومن ثم انزياح امتصاص الكربونيل الى عدد موجي اعلى (عند 1674.96 cm⁻¹) اي زيادة قيمة الامتصاص الامتطاطي للكربونيل 5.05 cm⁻¹ , اما في المركب A2 المحضر من تكاثف البنزالديهيد مع اليوريا بنسبة (1 : 2) مول (يوريا : بنزالديهيد) فان مجموعتي الايمين C = N زادت العدد الموجي لامتصاص الكربونيل الى 1678.21 cm⁻¹ اي زيادة قيمة امتصاص مجموعة الكربونيل بمقدار 8.3 cm⁻¹ يرافقه نقصان في طول الأصرة وزيادة في ثابت قوة الأصرة بسبب السحب الالكتروني الناتج من تكوين الأصرة المزدوجة لمجموعة الايمين ذات التهجين SP² (المركبين A1,A2) بخلاف كربونيل اليوريا التي ترتبط بمجموعتي الايمين الدافعة للالكترونات التي تقلل من صفة الأصرة المزدوجة لمجموعة الكربونيل بسبب دخول المزدوج الالكتروني للنتروجين برنين مع مجموعة الكربونيل والجدول (5) يوضح ثابت قوة الأصرة C = O لجميع المركبات المحضرة ورتبتها . اما المركبات (B1 , D2 , C1 , C2 , B2) , المحضرة من تكاثف البرومو بنزالديهيد مع اليوريا بنسبة (1 : 1) و (1 : 2) مول (يوريا : بروموبنزالديهيد) فلم يلاحظ للحث الالكتروني للبروم المعوض على

تأثر كربونيل اليوريا بمجموعتي الايمين والمجاميع المعوضة على الحلقة الاروماتية للبنزالديهيد :

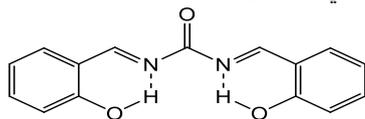
تظهر جميع الاميدات حزمة امتصاص كربونيل تعرف بحزمة الاميد ويعتمد موقعها على درجة التاصر الهيدروجيني ومن ثم على الحالة الفيزيائية للمركب اي يعتمد امتصاص الكربونيل على العوامل البيئية نفسها التي تؤثر بامتصاص الكربونيل للمركبات الاخرى فمثلا يتسبب استبدال مجموعة الكيل لكيتون بذرة مغايرة (X) ذات سالبية كهربائية عالية في ازاحة امتصاص مجموعة الكربونيل الى عدد موجي اعلى ويعتمد اتجاه الازاحة على سيادة تأثير الحث (a) او الرزونانس (b) .



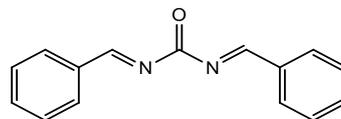
فتأثير الحث يقصر طول الأصرة ويزيد ثابت قوتها والطول الموجي لامتصاصها أما تأثير الرزونانس فيزيد طول الأصرة وينقص الطول الموجي لامتصاصها [9]

تم اخذ طيف الأشعة تحت الحمراء لليوريا قبل التفاعل فوجد ان مجموعة الكربونيل تمتص عند الموقع 1669.91 cm⁻¹ وعند تفاعل اليوريا مع البنزالديهيد غير المعوض بنسبة (1 : 1) مول (المركب A1) لوحظ ان مجموعة الكربونيل تمتص عند 1674.96 cm⁻¹ اي ان

أما بالنسبة إلى المركبات (E1 , E2 , F1) والبنزالددهايد المعوض بمواقع مختلفة بمجموعة الهيدروكسيل والنسب المذكورة سابقا فالمركبات (E1 , G1) كان للرزونانس الناتج من مجاميع الهيدروكسيل مع النظام المتعاقب تأثير واضح في إزاحة امتصاص مجموعة الكاربونيل إلى عدد موجي اقل إذ كان معدل النقصان في العدد الموجي للامتصاص 6.72 cm^{-1} ومعدل ثابت قوة الأصرة 12.70 d/cm . أما المركبات المحضرة من تكاثف مجموعتي الأمين (E2 , G2) فقد كان معدل النقصان في العدد الموجي للكاربونيل 8.67 cm^{-1} ومعدل ثابت قوة الأصرة 12.72 d/cm إذ كان في هذه المركبات تأثير الرزونانس هو السائد أكثر من تأثير التآصر الهيدروجيني لأن مجموعة الهيدروكسيل في هذه المركبات معوض بمواقع (p , m) التي لا تسمح بتكوين الأصرة الهيدروجينية لبعدها المسافة عن مركز الجزيئة . يمكن ملاحظة تأثير التآصر الهيدروجيني في المركبات (F1 , F2) والمحضرة من تكاثف اليوريا مع السلسلددهايد والنسب المذكورة سابقا فقد ازاح امتصاص مجموعة الكاربونيل إلى عدد موجي اعلى إذ لم يحصل التآصر مع مجموعة الكاربونيل وانما مع مجموعة الامين لانها اقرب من الكاربونيل لمجموعة الهيدروكسيل فتزداد بذلك السالبة الكهربائية للمجموعة $C = N$ ومن ثم سحب الكتروني أكثر وبالتالي إزاحة الامتصاص لمجموعة الكاربونيل إلى عدد موجي اعلى ففي المركب F1 كان معدل الزيادة في العدد الموجي لامتصاص الكاربونيل مقارنة بالمركب A1 مساوية إلى 4.78 cm^{-1} والزيادة في ثابت قوة الأصرة 0.07 d/cm اما في المركب F2 فقد كانت نسبة الزيادة في العدد الموجي لامتصاص الكاربونيل عن المركب A2 مساوية إلى 9.21 cm^{-1} والزيادة في ثابت قوة الأصرة 0.14 d/cm اي ان الزيادة تقريبا مساوية إلى ضعف العدد الموجي وثابت قوة الأصرة . والشكل الآتي يوضح التآصر الهيدروجيني الحاصل بين مجموعتي الهيدروكسيل المعوضة على موقعي الاورثو ومجموعتي الامين .



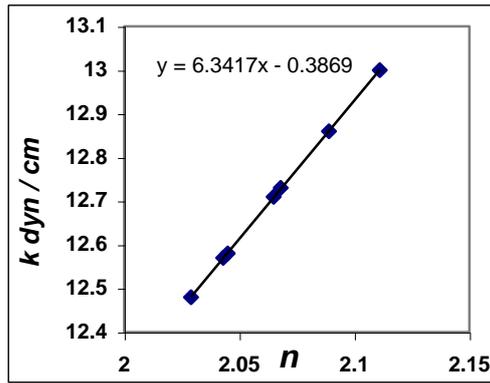
الحلقة الاروماتية اي تأثير على حزمة امتصاص الكاربونيل (لم تراج حزمة الامتصاص الامتطاطي للكاربونيل إلى عدد موجي اعلى) بسبب بعد مواقع تعويض البروم عن مجموعة الكاربونيل وذلك لأن تأثير الحث الالكتروني يكون معدوماً عندما يكون موقع التعويض مفصول بذرتين او اكثر عن نقطة الدراسة [10] , لكن كان للريزونانس تأثيراً واضحاً في امتصاص مجموعة الكاربونيل مقارنة بمواقع امتصاص كاربونيل المركبين (A1 , A2) لان المركبات المحضرة تحتوي على نظام اواصر متعاقب يساعد على وصول الرزونانس إلى مجموعة الكاربونيل وكما موضح في الصيغة التركيبية الآتية .



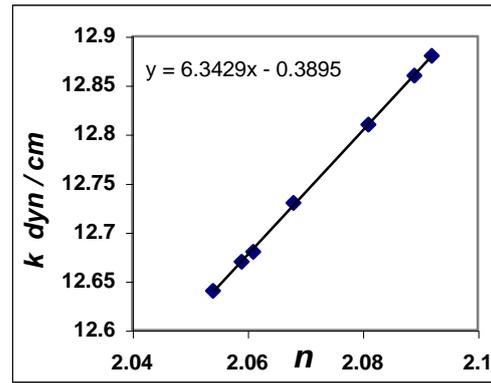
عند ملاحظة التركيب السابق يتبين ان التعويض على موقعي (O , P) يكون أكثر تأثيراً في صفة الأصرة المزدوجة لمجموعة الكاربونيل إذ ان الرزونانس عبر النظام المتعاقب السابق يقوم بتقليل صفة الأصرة المزدوجة ومن ثم زيادة طول الأصرة وقلة ثابت الأصرة واخيرا امتصاص مجموعة الكاربونيل في عدد موجي اقل . فعند ملاحظة مواقع امتصاص كاربونيل المركبات (B1 , C1 , D1) يتبين ان النقصان في العدد الموجي لامتصاص مجموعة الكاربونيل اقل من النقصان في امتصاصها في المركبات (B2 , C2 , D2) لان المركبات الاولى تمتلك ذرة بروم واحدة معوضة على الحلقة والمسؤولة عن تقليل صفة الأصرة المزدوجة إذ كان معدل النقصان في العدد الموجي للامتصاص (7.49 cm^{-1}) ومعدل الزيادة في ثابت قوة الأصرة 12.73 d/cm هذا بالنسبة إلى تكاثف احدى مجموعتي الامين والعلاقة الخطية في الشكل (3) توضح ذلك . اما في المركبات (B2 , C2 , D2) والمحضرة من تكاثف مجموعتي الامين لليوريا فقد كان معدل النقصان في العدد الموجي لامتصاص مجموعة الكاربونيل 20.40 cm^{-1} ومعدل ثابت قوة الأصرة 12.55 d/cm لان هذه المركبات تمتلك ذرتي بروم والمسؤولة عن تقليل صفة الأصرة المزدوجة في المركبات الناتجة من تكاثف مجموعتي الامين مع البنزالددهايد المعوض بالبروم والعلاقة الخطية في شكل (4) توضح ذلك .

جدول (5) يوضح قيم ثابت قوة الأصرة ورتبتها للمركبات المحضرة

Comp.	A ₁	A ₂	B ₁	B ₂	C ₁	C ₂	D ₁	D ₂	E ₁	E ₂	F ₁	F ₂	G ₁	G ₂	urea
K d/cm	12.81	12.86	12.68	12.48	12.64	12.57	12.86	12.58	12.67	12.71	12.88	13.00	12.73	12.73	12.73
n	2.081	2.089	2.061	2.029	2.054	2.043	2.089	2.045	2.059	2.065	2.092	2.111	2.068	2.068	2.068



شكل (4) يوضح العلاقة بين رتبة الاصرة وثابت القوة للمركبات ثنائية قاعده شف



شكل (3) يوضح العلاقة بين رتبة الاصرة وثابت القوة للمركبات احادية قاعده شف

جدول (6) الصيغ التركيبية و أسماء المركبات المحضرة وبعض ثوابتها الفيزيائية (درجة الانصهار واللون)

Comp.	Structure	Name	m.p.	color
A ₁		(E)-1-benzylideneurea	74 - 75	White
A ₂		(1E,3E)-1,3-dibenzylideneurea	77 - 78	=
B ₁		(E)-1-(2-bromobenzylidene)urea	91 - 92	=
B ₂		(1E,3E)-1,3-bis(2-bromobenzylidene)urea	204 - 205	=
C ₁		(E)-1-(3-bromobenzylidene)urea	183 - 184	=
C ₂		(1E,3E)-1,3-bis(3-bromobenzylidene)urea	185 - 187	=
D ₁		(E)-1-(4-bromobenzylidene)urea	187 - 188	=
D ₂		(1E,3E)-1,3-bis(4-bromobenzylidene)urea	229 - 230	=
E ₁		(E)-1-(4-hydroxybenzylidene)urea	49 - 50	Deep red
E ₂		(1E,3E)-1,3-bis(4-hydroxybenzylidene)urea	60 - 61	Deep orange
F ₁		(E)-1-(2-hydroxybenzylidene)urea	118 - 119	yellow
F ₂		(1E,3E)-1,3-bis(2-hydroxybenzylidene)urea	120 - 121	=
G ₁		(E)-1-(3-hydroxybenzylidene)urea	69 - 70	White
G ₂		(1E,3E)-1,3-bis(3-hydroxybenzylidene)urea	80 - 81	=

- 6 – Pistorius , C. W. F. T. 1958 .
Relation among bond order , force constant , bond length for C-O bond . J. Chem. Phys. 29(117) .
- 7 – Krishxa , M.G. Pillai.1962.
Stretching Force Constant of the Carbonyl Bond in Unconjugated Ketones .J. Physik. chem.218(334).
- 8 – Thompson , H. W. & Linnett , J. N. 1937. Infrared spectrum of the fundamental vibration-rotation band J. Chem. Soc. 7 (1291) .
- 9 – Silverstein , Robert M . 1981 .Spectrometric Identification of organic compounds .john wiley & sons 4th ed. New yourk .pp.117.
- 10 – Sykes, Peter . 1985 .Agidebook to mechanism in organic chemistry , Sixth Edition . john wiley & sonc Inc . New Yourk .pp 167.

المصادر:

- 1- skoog , Doglas A. 1985 . principles of instrumental analysis , saunders college publishing . 3rd ed . New York , pp 879 .
- 2- Enrique , E.J.B & Baran , J . 2003 . Mean Amplitudes of Vibration of Halogen Molecules . Facultad de Ciencias Argentina . 58a , 36 - 38 .
- 3- Robenson ,E.A. & Lister , M.W.1963 . A linear relationship between bond order and stretching force constants . Canadian J.of Chemistry . 4(41) : 2988 – 2995 .
- 4- Gray, P. & Waddingtont ,T. C. 1957. Relation between bond order and force constant. Trans Faraday Soc. 53 (901) :134 – 141.
- 5 – Herzberg , G. 1945 . Infra-red and raman spectra , J. Chem. Phys. 29(117): 193 – 198.

Spectroscopic Study for Resonance Effects on the Carbonyl Double Bond Order in Urea Schiff Bases Which Contain Conjugated System

*Abdullah H. Kshash**

*Mohammed O. Ezzat***

*Ziad K. Abdul Razzak**

* Chemistry dep. education college for Pure Science AL-anbar university

** Chemistry dep. education college for women AL-anbar university

Abstract:

In this work we prepared some schiff bases by condensation urea and benzaldehyde or its derevative (bromo benzaldehyde or hydroxy benzaldehyde) as (1 : 1) mole (urea : benzaldehyde or its substitution) to prepare compounds (A₁ , B₁ , C₁ , D₁ , E₁ , F₁ , G₁) and (1 : 2) mole (urea : benzaldehyde or its substitution) to prepare compounds (A₂ , B₂ , C₂ , D₂ , E₁ , F₂ , G₂) . The prepared compounds identified spectroscopic by infrared spectroscopy FT-IR and Thin layer chromatography T.L.C . The force constant calculated from the wave number for the carbonyl stretching from FT-IR chart and by using the following equation

$$K = 4\pi^2 C^2 \nu^2 \mu$$

The change in double bond order for carbonyl deteremined in according with some past research by compare the force constant for the prepared compounds with the force constant in past research and calculated bond order statistically by extract the curve equation and calculated the bond order by application curve equation .