

عنوان مقاله:

مطالعه مکانیک کوانتومی تاثیر استخلاف های مختلف بر روی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی دردی کتون

محل انتشار:

چهارمین همایش ملی فن آوری های نوین شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسنده:

اکرم رحیمی - گروه شیمی و مهندسی شیمی، واحد دورود، دانشگاه آزاد اسلامی، دورود- ایران

خلاصه مقاله:

پیوند هیدروژنی نقش بسیار مهمی را در زندگی و سیستمهای زنده بازی می کند. هدف این تحقیق بررسی تاثیر استخلافهای مختلف بر روی قدرت پیوند هیدروژنی می باشد. باری این منظور موبکوب دی کتون حلقوی انتخاب گردید. ابتدا ساختار مولکولها با نرم افزار گوسین بهینه سازی گردید؛ سپس با استفاده از نرم افزار AIM دانسیته ی ابر الکترونی در نقطه ی بحرانی پیوندی بین اتم هیدروژن و اتم اکسیژن مجاور محاسبه گردید. در نهایت با استفاده از نرم افزار گوسین و تجزیه و تحلیل اوربیتال های مولکولی این مولکولها؛ تاثیر استخلافها و شاخصهای pEDA ، sEDA و tEDA مشخص گردید.

کلمات کلیدی:

پیوند هیدروژنی، پیوند سیگما، پیوند پای tEDA ، pEDA ، sEDA

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/462187>

