

عنوان مقاله:

مطالعه اثر موقعیت و تعداد اتمهای نیتروژن بر روی آروماتیسیتة موضعی حلقههای کربازول

محل انتشار:

چهارمین کنفرانس ملی تحقیقات نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

ژیلا لاله نژاد - گروه شیمی دانشکده علوم دانشگاه شهیدچمران ایران

حسین حمادی - گروه شیمی دانشکده علوم دانشگاه شهیدچمران ایران

احسان شاکرزاده - گروه شیمی دانشکده علوم دانشگاه شهیدچمران ایران

خلاصه مقاله:

در این مطالعه گروهی از ترکیبات آلی شامل مشتقات کربازول از نظر تاثیر قرار گیری اتم نیتروژن در حلقههای پیرامونی و اثر آن بر روی آروماتیسیتة حلقه پیروول میانی بررسی گردید. در هر یک از حلقههای بنزنی ترکیب کربازول اتم نیتروژن به گونههای مختلف جابهجا گردید و مشتقات به دست آمده به پنج گروه تقسیم بندی شدند. تمام ساختارها به طور تک به تک با استفاده از سطح محاسباتی B3LYP/6-31+G/d,p بهینه سازی گردیدند. شاخصهای بیانگر آروماتیسیتة از جمله HOMA, FLU, NICS محاسبه گردید و نتایج نشان داد که با جابهجا شدن اتم نیتروژن در تمام موقعیتهای، آروماتیسیتة حلقه پیروولی متناسب با موقعیت اتم نیتروژن کم و زیاد شد و همچنین نسبت به حلقه پیروول تنها، آروماتیسیتة به شدت کاهش یافت. در این میان، موقعیت 2 و 0 از حلقههای بنزنی بهترین موقعیت برای قرارگیری اتم نیتروژن شناخته شدند.

کلمات کلیدی:

کربازول، آروماتیسیتة، مدل نوسانگر هماهنگ آروماتیسیتة HOMA، جابهجایی شیمیایی مستقل از هسته NICS

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/467320>

