

## عنوان مقاله:

مطالعه نظری اثر استخلاف بر روی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی در لیگاند 2-[-2] (2- هیدروکسی-پروپیل ایمینو) متیل - فنول

## محل انتشار:

سومین کنفرانس سراسری نوآوری های اخیر در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

## نویسندگان:

مرضیه محمدی - گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، ایران

سمیرا سعیدنیا - گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، ایران

مهدی هاتفی اردکانی - گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، ایران

قدسیه نوروزی - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی معدنی دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مطالعه، تاثیر گروه های الکترون کشنده و الکترون دهنده بر روی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی در لیگاند 2-[-2]- هیدروکسی-پروپیل ایمینو) متیل - فنول توسط روش های نظری مورد بررسی قرار گرفت. این استخلاف ها در موقعیت 5 لیگاند فوق قرار گرفته اند. بهینه سازی ساختارها در سطوح (B3LYP/6-311++G(d,p) و HF/6-311++G(d,p) توسط نرم افزار گاوسی 03 انجام شد. محاسبات فرکانسی نیز در سطح (B3LYP/6-311++G(d,p) صورت گرفت. مکان شناسی چگالی بار الکترونی به کمک نرم افزار AIM2000 روی توابع موج بدست آمده در سطح (B3LYP/6-311++G(d,p) مورد بررسی قرار گرفت. چگالی الکترونی و لاپلاسی چگالی الکترونی در نقطه بحرانی پیوند هیدروژنی محاسبه شد.

## کلمات کلیدی:

پیوند هیدروژنی درون مولکولی، 2-[-2] (2- هیدروکسی-پروپیل ایمینو) متیل - فنول، روش های نظری، AIM

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/569456>

