سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
بررسی ایزومرهای پیرازولیل کاربن به کمک روش های محاسباتی

محل انتشار:
نخستین همایش ملی توسعه در علوم و صنایع شیمیایی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:
سیمین سماوات - *گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج*

بیتا محتاط - *گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج*

خلاصه مقاله:
به منظور بررسی اثر استخلاف های پیرازولیل بر روی مراکز کاربنی یک تحقیق محاسباتی به روش تابعیت چگالی الکترون به کمک مجموعه پایه (B3LYP/6-31G(d)//B3LYP6-311++G(d,p بر روی سطح انرژیساختارها و پارامترهای هندسی ایزومرهای مختلف پیرازولیل کاربن انجام شده است. نتایج نشان میدهد که در ساختارهای کاربنی ایزومری که در آن مرکز کاربنی به اتم نیتروژن متصل است بیشترین پایداری را داراست. درتایید تحقیقات گذشته تمامی ساختارهایی که در مجاورت مرکز کاربنی اتم نیتروژن قرار دارد دارای کانفورمرهای سین و آنتی می باشند

کلمات کلیدی:
پیرازولیل کاربن، پیوند هیدروژنی، نظریه تابعیت چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/604634