

عنوان مقاله:

بررسی اثر استخلاف بر روی ایزومرهای سین و آنتی 2 پیریدیل کاربن

محل انتشار:

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

مهرداد ریاضی کیا - گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج، کرج، ایران

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

خلاصه مقاله:

به منظور بررسی اثر استخلاف بر روی مرکز کاربنی در 2-پیریدیل کاربن یک بررسی محاسباتی به روش $p,d(G++311/6-)$ B3LYP//d(31G-6/B3LYP انجام شد. نتایج نشان می‌دهند که بر خلاف 2-پیریدیل کاربن هنگامی گروه های الکترون کشنده همچون NO_2, CN, F به عنوان استخلاف مرکز کاربنی قرار میگیرند، در حالت آنتی دارای کانفورمرهای مسطح هستند. نتایج همچنین نشان دهنده وجود 4 ایزومر برای هیدروکسی پیریدیل کاربن می باشند که کانفورمری که در آن اتم هیدروژن گروه هیدروکسی نزدیک ترین فاصله را به اتم نیتروژن دارد دارای بیشترین پایداری است. Δ anti-syn نیز توسط گروههای الکترون دهنده افزایش یافته و با گروههای الکترون گیرنده کاهش می یابد.

کلمات کلیدی:

پیریدیل کاربن، نظریه تابعیت چگالی، اثر استخلاف

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/604646>

