

عنوان مقاله:

بررسی کنفورماسیون و توتومری در ترکیب بنزیل استو استات

محل انتشار:

همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

فرناز نقوی شیخ الاسلامی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود

سید فرارمز طیاری - دانشگاه فردوسی مشهد

بهزاد چهکندی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود

خلاصه مقاله:

توتومری، کنفورماسیون و انتساب شیوه های ارتعاشی برای مولکول بنزیل استو استات با استفاده از روش تابعی چگال (b3lyp) مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. نتایج شیوه های ارتعاشی نظری محاسبه شده برای کمترین انرژی توتومرهای کتونی و انولی به خوبی با نتایج تجربی تطبیق داده شده است. قدرت پیوند هیدروژنی محاسبه شده در شکل انولی 14/84 کیلو کالری برمول است که نشان می دهد به میزان قابل توجهی ضعیفتر از قدرت پیوند هیدروژنی در استیل استون است (17.4 کیلوکالری برمول). فرکانس ارتعاشی O-H در بنزیل استو استات در حدود 3100 cm^{-1} و فرکانس خمشی خارج از صفحه آن 784 cm^{-1} است که نشان می دهد پیوند هیدروژنی در این ترکیب به مراتب ضعیفتر از پیوند هیدروژنی مشابه در استیل استون است که با نتایج به دست آمده از NMR نیز همخوانی دارد.

کلمات کلیدی:

بنزیل استو استات- نظریه تابعی چگالی- تجزیه و تحلیل کنفورماسیون

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/70968>

