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

## عنوان مقاله:
طراحی بازه ای آلی بر پایه آزافان با استفاده از برهمکنش کاتیون-π و محاسبات تئوری تابعیت چگالی

## محل انتشار:
دومین کنگره ملی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا فناوری (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

## نویسندگان:
حمید سعیدیان - *دانشگاه پیام نور، دانشکده علوم، گروه شیمی، تهران، ایران*

روشنک خرمی - *دانشگاه پیام نور، دانشکده علوم، گروه شیمی، تهران، ایران*

زهرا شفیعی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران، ایران*

زهره میرجعفری - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران، ایران*

## خلاصه مقاله:
در این تحقیق اثر برهمکنش π-کاتیون برروی خواص بازی ترکیبات آزافانی با استفاده از محاسبات کوانتومی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان می دهد که این برهمکنش خاصیت بازی این ترکیبات را نسبت به بازهای معمولی همانند تری اتیل آمین بالا می برد. نتایج با استفاده از محاسبه شاخص های آروماتیسیته حلقه بنزن موردتائید قرارگرفته است. در بخش دیگر این کار کاتیون دوستی آزافان ها و تاثیر برهمکنش π-کاتیون بر لیتیم دوستی آن ها مورد بررسی قرار گرفت.

## کلمات کلیدی:
آروماتیسیته، DFT، شاخص آروماتیسیته، آزافان، برهمکنش π-کاتیون، کاتیون دوستی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/969363