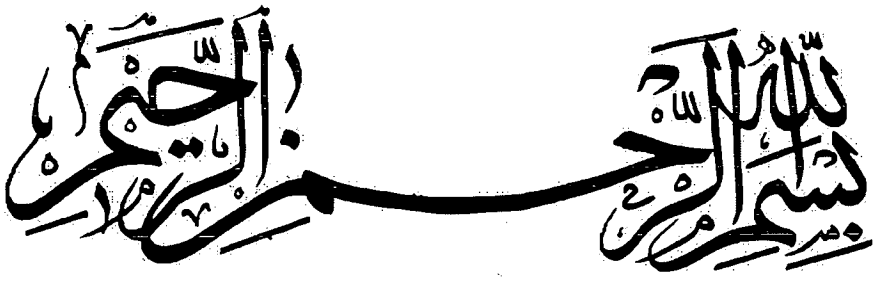

١٥٨٩٢

واحد شاهرود
دانشکده علوم پایه، گروه شیمی
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد«M.Sc»
گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی نظری تعادل بین کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی و محلول

استاد راهنما:
دکتر بهزاد چهکندی

استاد مشاور:
دکتر صفا علی عسگری

نگارش:
وحید سهرابی

تابستان ۱۳۸۹

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران
مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
IRANDOC

۱۵۸۰۹۲

۸ /۳۱/ ۱۳۹۰

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

بررسی تعادل بین کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی و حلال با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

نگارش :

وحید سهرابی

تابستان ۱۳۸۹

هیأت داوران :

۱ . دکتر بهزاد چهکندی

۲ . دکتر صفا علی عسکری

۳ . دکتر فرامرز طیاری

٤. دکتر احسان زاهدی

تقدیر و تشکر

حمد وستایش بی قیاس خدای را سزاست که از الطاف خود در انسان دمید و او را اشرف مخلوقات خود قرار داد.
بدینوسیله وظیفه خود می دانم از استاد راهنمای محترم جناب آقای دکتر بهزاد چمکندی که با راهنمایی و زحمات بی شائبه خود موجبات پیشرفت در این تحقیق را فراهم نمودند و همچنین از استاد مشاور محترم جناب آقای دکتر صفا علی عسگری که با صبر و حوصله ، مشاوره مورد نیاز را در اختیار اینجانب قرار دادند و همچنین کلیه عزیزانی که به انحاء و شیوه های مختلف موجبات کمک و دلگرمی مرا فراهم نمودند سپاسگزاری نمایم.

فهرست مطالب:

چکیده: ۱

فصل اول: ساختار سیکلو هگزان

۱-۱-مقدمه: ۳

۱-۲-ساختار سیکلوهگزان ۴

۱-۳-صورتبندیهای سیکلوهگزان ۴

۱-٤-کنفورماسیون مشتقات سیکلوهگزان ۷

۱-٥-پیوندهای محوری واستوایی در سیکلوهگزان ۹

۱-٦-تحلیل صورتبندی سیکلوهگزانهای تک استخلافی ۱۰

۱-۷- وارونگی صورتبندی (وارونگی حلقه) در سیکلوهگزان ۱۱

۱-۸-آنتالپی، انرژی آزاد و ثابت تعادل ۱۲

۱-۹-انعطاف پذیری صورتبندی سیکلوهگزان ۱۴

۱-۱۰-برتری کنفورماسیونی استخلاف ها : ۱۷

۱-۱۱-کاربرد اختلاف انرژی آزاد کنفورماسیونی : ۲۰

۱-۱۲-استرئوایزومری ترکیبات حلقوی – آنالیز کنفورماسیونی ۲۱

۱-۱۳-خواص فیزیکی آلکانهای حلقوی ۲۶

۱-۱٤-پایداری آلکانهای حلقوی ۲۶

۱-۱٥-فعالیت یا واکنشپذیری آلکانها ۲۸

۱-۱٦-استریو ایزومری در سیکلوهگزان ۲۹

۱-۱۷ –تفاوت بین حلقه سیکلوهگزان وسیکلوهگزانون ۳۰

۱-۱۸-سنتز سیکلوهگزانون ۳۱

۱-۱۹-ترکیبات فسفردار..... ۳۲

۱-۱۹-۱- گروههای عاملی حامل فسفر..... ۳۲

۱-۱۹-۲- انواع ترکیبات فسفردار..... ۳۲

۱-۱۹-۳- فسفین(PH3) ۳۲

۱-۱۹-٤- هالیدهای فسفر ۳۲

فصل دوم: مطالعات پیرامون مولکولهای مشابه با سیکلو هگزیلیدین فسفین

۲-۱-مطالعات نظری وتجربی ۲-هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین ۳۵

فصل سوم: روشهای محاسباتی

۳-۱-مقدمه ۴۹
۳-۲-روشهای مدلسازی کامپیوتری ۵۰
۳-۲-۱-مکانیک مولکولی ۵۱
۳-۲-۲-کاربردهای مکانیک مولکولی ۵۳
۳-۲-۳-مکانیک کوانتومی ۵۳
۳-۲-٤- کاربردهای مکانیک کوانتومی ۵۵
۳-۲-٤-۱- حل معادله شرودینگر الکترونی ۵۶
۳-۲-٤-۲-تقریب«بورن-آپنهایمر» ۵۹
۳-۲-۵- روش نیمه تجربی ۵۹
۳-۲-۵-۱- روشهای اوربیتال ملکول نیمه تجربی پیشرفته:MNDO ۵۹
۳-۲-۵-۲-تقریبهای اولیه MNDO: ۶۰
۳-۲-۵-۳-روشهای نیمه تجربی مختلف ۶۱
۳-۲-۵-٤-MNDO نظریه پایه ۶۲
۳-۲-٦-روش آغازین ۶۳
۳-۲-٦-۱-معادله های هارتری فاک ۶۳
۳-۲-٦-۲-روش برهم کنش آرایش «CI» ۶۶
۳-۲-٦-۲-۱-روش SCF چندپیکربندی ۶۷
۳-۲-٦-۲-۲-روش اوربیتالهای طبیعی ۶۷
۳-۲-٦-۳-همبستگی الکترون ۶۷
۳-۲-٦-٤-نظریه اختلال ۶۸
۳-۲-٦-۵-روش تابع چگال(DFT): ۶۹
۳-۲-۷-مجموعه پایه ۷۱
۳-۲-۷-۱-اوربیتالهای اسلیتری(STO): ۷۲

۳-۲-۷-۲-مجموعه های پایه گوسی(GTO) ۷۳
۳-۲-۷-۳-اوربیتالهای گوسی منطبق(CGTO) ۷۳
۳-۲-۷-٤-مجموعه های پایه ی مینیمال ۷۴
۳-۲-۷-٥-مجموعه های پایه ی ظرفیتی مجزا ۷۴
۳-۲-۷-٦- مجموعه های پایه ی قطبیده ۷٥
۳-۲-۷-۷-توابع پخش شده ۷٥
۳-۲-۸- محاسبات نیمه تجربی در مقابل محاسبات«آغازین» ۷۶
۳-۲-۸-۱-محاسبات میدان خودسازگارPPP ۷۶
۳-۲-۸-۲-انواع روشهای شیمی محاسباتی: ۷۹
۳-۲-۹-گرماشیمی در گوسین ۸۰
۳-۲-۹-۱-انرژی الکترونی ۸۰
۳-۲-۹-۲-انرژی ارتعاش ۸۰
۳-۲-۹-۳-تصحیح انرژی کل ۸۰
۳-۲-۹-٤- تصحیح گرمایی انرژی داخلی ۸۱
۳-۲-۹-٥-آنتالپی ۸۱
۳-۲-۱۰-برنامه Gaussian 98 ..... ۸۲
۳-۲-۱۰-۱-فایل ورودی Gaussian ۸۳
۳-۲-۱۰-۲-انواع پیوندها ۸۳
۳-۲-۱۰-۳-کار Opt ۸٥
۳-۲-۱۰-٤-کار Freq ۸٥
۳-۲-۱۰-٥-فایل خروجی Gaussian ۸۶
۳-۲-۱۰-٦- آینده شیمی کوانتومی ۸۶

فصل چهارم: نتایج محاسبات

٤-۱-مقدمه: ۸۹
٤-۲-انواع حلالها ۹۲
٤-۳-مدلهای تئوری ۹۲
٤-٤- گشتاور قطبی الکتریکی μ دو بار با علامتهای متفاوت ۹۳

٤-٥-قطبش پذیری (α) ٩٣
٤-٦-نتایج محاسبات در فاز گاز: ٩٤
٤-٧- انرژی ومقادیر ترمودینامیکی ٩٤
٤-٨- ژئومتری های بهینه شده ١١٥
٤-٩- نتایج محاسبات در فاز حلال ١٢٥
٤-٩-١- مقادیرترمودینامیکی در فاز حلال ١٢٥
٤-١٠- بررسی مقادیر ΔE در حلالهای مختلف ٢٥٠
٤-١١- بررسی مقادیر ترمودینامیکی ٢- فلوئورو سیکلو هگزیلیدین فسفین درحلال های مختلف ٢٥٤
٤-١٢- بررسی مقادیر ترمودینامیکی ٢-کلرو سیکلو هگزیلیدین فسفین درحلال های مختلف ٢٦١
٤-١٣- بررسی مقادیر ترمودینامیکی ٢- برموسیکلو هگزیلیدین فسفین درحلال های مختلف ٢٦٨
٤-١٤- بررسی ممان دو قطبی ٢- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف ٢٧٥
٤-١٥- ژئومتری های بهینه شده در فاز محلول ٢٨٠
٤-١٦- بحث و نتیجه گیری ٢٩١
منابع ومآخذ ٢٩٠

شکل(۱-۱). یک مدل گلوله ومیله ویک مدل فضاپرکن از صورتبندی صندلی سیکلوهگزان

شکل (۱- ۸). پیوندهای استوایی ومحوری در سیکلوهگزان..... ۲

شکل (۱- ۲۲). کنفورمرهای متیل سیکلوهگزان و کنفورمرهای ترشیوبوتیل ۲۵

شکل (۱- ۲۶). استریوایزومری در مشتقات سیکلوهگزان در موقعیت ۲،۱

جدول (۱-۴). استریوایزومری در مشتقات سیکلوهگزان ۲۹

جدول(۲-۱). انرژیهایGibbs از آن واکنش با L ، $w(co)_6 + L \rightarrow w(co)_5 + co$ کئوردینهشده در سبکهای مختلف ۳۶

شکل(۲- ۱). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزانون..... ۳۷

شکل(۲- ۲). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزاتیون ۳۷

شکل(۲- ۳). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزیلیدین آنیلین..... ۳۸

شکل (۲- ۴). استفاده از کمپلکسهای π هگزاکربونیل تنگستن سیکلوهگزانون ۳۸

شکل (۲- ۷). کنفورمرهای مشتقات ۲-هالوسیکلوهگزانون(2a,2e)..... ۴۱

شکل (۲- ۸). کنفورمرهای ممکن برای (a) ۳-فلوئورو بوتان – ۲-ان و (b)۳،۳ –دیفلوئورو بوتان – ۲-ان ۴۳

شکل (۲- ۹). تعادل بین صورتبندی کنفورمرهای سیکلوهگزان(1a,1b)..... ۴۴

شکل (۲- ۱۰). تتراهیدرو-2H- تیوپیران-۱-اکسید(2a,2b) ۴۵

شکل (۲- ۱۱). ۱و۲-دی تیان-۱-اکسید(3a,3b)..... ۴۵

شکل (۲- ۱۲). تتراهیدرو-2H-تیوپیران-۱-اکسید(4a,4b) ۴۵

جدول (۳-۳). انواع کارهای قابل دسترس در Gaussian..... ۸۶

فهرست اشکال

شکل(۱-۱). یک مدل گلوله ومیله ویک مدل فضاپرکن از صورتبندی صندلی سیکلوهگزان ۵

شکل (۱-۲). صورتبندی صندلی سیکلوهگزان که عاری از کشش است.کلیه زوایای پیوند C-C-C نزدیک به 109° وکلیه پیوندهای C-H همانطور که در طرح نیومن(ج) دیده می شود،نپوشیده هستند.....۵

شکل (۱-۳). مدل توپ ومیله ومدل فضاپرکن صورتبندی قایق سیکلوهگزان.فشار پیچشی حاصل از پیوندهای پوشیده وفشار واندروالسی هیدروژن های پرچمی باعث ناپایداری صورتبندی قایق نسبت به صورتبندی صندلی می شوند.....۶

شکل(۱-۴). الف- قایق وب- قایق پیچ خورده در صورتبندی های سیکلوهگزان.مقدار فشار پیچشی در قایقی در اثر چرخش پیوندهای C-C وتبدیل به قایق پیچیده،کاهش می یابد.فشار پیچشی در قایق توسط چرخش حول پیوند C-C ،برای ایجاد قایق پیچیده،کاهش می یابد.همچنین،این حرکت موجب می شود که هیدروژن های پرچمی از یکدیگر دور شوند که موجب کاهش فشار واندروالسی بین آنها می شود. ..۶

شکل (۱- ۵). خصوصیاتی از ساختار کنفورماسیون صندلی.....۸

شکل (۱- ۶). پوشیدگی در کنفورماسیون‌های صندلی ، قایق ، پیچ خورده.....۸

شکل (۱- ۷). اتمهای هیدروژن محوری واستوایی در سیکلوهگزان.شش پیوند محوری C-H نسبت به محور حلقه موازی‌اند وشش پیوند استوایی C-H در دایره استوایی حلقه قرار دارند. ۹

شکل (۱- ۸). پیوندهای استوایی ومحوری در سیکلوهگزان ۱۰

شکل (۱- ۹). تحلیل صورتبندی سیکلوهگزان‌های تک استخلافی.....۱۱

شکل (۱- ۱۰). دیاگرام انرژی نشان دهنده تبدیل متقابل صورتبندی‌های گوناگون سیکلوهگزان ۱۲

شکل (۱- ۱۱). توزیع دو محصول در حال تعادل در دمای $25^{\circ}C$ به صورت تابعی از تفاوت انرژی آزاد استاندارد (ΔG°) بین آنها. ۱۳

شکل (۱- ۱۲). با وارونگی حلقه در صورتبندی صندلی سیکلوهگزان،موقعیتهای محوری واستوایی تعویض می‌شوند. ۱۴

شکل (۱- ۱۳). با وارونگی حلقه در صورتبندی صندلی متیل سیکلوهگزان،موقعیتهای محوری واستوایی تعویض می‌شوند. ۱۵

شکل (۱- ۱۴). کنفورمرهای فلوئوروسیکلوهگزان.....۱۶

شکل (۱- ۱۵). کنفورمرهای ایزوپروپیل سیکلوهگزان ۱۶

شکل (۱- ۱۶). کنفورمرهای ترشیوبوتیل سیکلوهگزان.....۱۷

شکل (۱- ۱۷). کنفورمرهای سیکلوهگزان که گروه R در موقعیت محوری و استوایی قرار گرفته است. ۱۸

شکل (۱- ۱۸). کنفورمرهای ۴-متیل سیکلوهگزانول.....۲۰

شکل (۱- ۱۹). روشهای طیف‌سنجی ، معکوس شدن، کنفورماسیون سیکلوهگزان.....۲۲

شکل (۱- ۲۰). وارونگی کنفورمرهای کلروسیکلوهگزان.....۲۳

شکل (۱- ۲۱). اثر متقابل اسیکوبوتان بر سیکلوهگزان استخلافی.....۲۴

شکل (۱- ۲۲). کنفورمرهای متیل سیکلوهگزان و کنفورمرهای ترشیوبوتیل ۲۵

شکل (۱- ۲۳). انحراف زاویه α در سیکلوآلکانها..... ۲۷
شکل (۱- ۲۴). تعادل بین صورتبندی قایق وصندلی..... ۲۸
شکل (۱- ۲۵). استریوایزومری در مشتقات سیکلوهگزان در موقعیت ۲،۱..... ۲۹
شکل (۱- ۲۶). استریوایزومری در مشتقات سیکلوهگزان در موقعیت ۲،۱..... ۳۰
شکل (۱- ۲۷). سنتز سیکلوهگزانون..... ۳۱
شکل(۲- ۱). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزانون..... ۳۷
شکل(۲- ۲). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزاتیون..... ۳۷
شکل(۲- ۳). سنتز کمپلکس π هگزاکربونیل تنگستن با سیکلوهگزیلیدین آنیلین..... ۳۸
شکل (۲- ۴). استفاده از کمپلکسهای π هگزاکربونیل تنگستن سیکلوهگزانون..... ۳۸
شکل (۲- ۵). تعادل بین کنفورمرهای ۲-هالوسیکلوهگزانون (X=F,Cl,Br,I)..... ۴۰
شکل (۲- ۶). تعادل بین کنفورمرهای ۲-هالوسیکلوهگزانون(1a,1e)..... ۴۱
شکل (۲- ۷). کنفورمرهای مشتقات ۲-هالوسیکلوهگزانون(2a,2e)..... ۴۱
شکل (۲- ۸). کنفورمرهای ممکن برای (a) ۳-فلوئورو بوتان – ۲-ان و (b)۳،۳ –دی‌فلوئورو بوتان – ۲-ان..... ۴۳
شکل (۲- ۹). تعادل بین صورتبندی کنفورمرهای سیکلوهگزان(1a,1b)..... ۴۴
شکل (۲- ۱۰). تتراهیدرو-2H- تیوپیران-۱-اکسید(2a,2b)..... ۴۵
شکل (۲- ۱۱). ۱و۲-دی تیان-۱-اکسید(3a,3b)..... ۴۵
شکل (۲- ۱۲). تتراهیدرو-2H-تیوپیران-۱-اکسید(4a,4b)..... ۴۵
شکل (۴- ۱). تعادل کنفورمرهای استوایی و محوری ۲-هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گاز در حالت Close..... ۹۰
شکل (۴- ۲). تعادل کنفورمرهای استوایی و محوری ۲-هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گاز در حالت Open..... ۹۱
شکل(۴- ۳). تعادل تبدیل کنفورمرهای ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین محوری به استوایی(X=F,Cl,Br)..... ۹۵
شکل(۴- ۴). تعادل بین ساختارهای بهینه کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های الف- F ب-Cl ج-Br در فاز گاز در حالت close در سطح MP2/6-31G*..... ۱۶۹
شکل(۴- ۵). تعادل بین ساختارهای بهینه کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های الف- F ب-Cl ج-Br در فاز گاز در حالت open در سطح MP2/6-31G*..... ۱۲۴
شکل(۴- ۶). ساختارهای بهینه شده ی کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های الف- F ب-Cl ج-Br در حلال سیکلوهگزان در سطح HF و سری پایه ی 6-31G*..... ۱۳۵
شکل(۴- ۷). ساختارهای بهینه شده ی کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های الف- F ب-Cl ج-Br در حلال اتانول در سطح HF و سری پایه ی 6-31G*..... ۱۶۹
شکل(۴- ۸). تعادل بین کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین در هالوژنهای (X=F,Cl,Br)..... ۲۵۰

شکل (۴- ۹). تعادل بین کنفورمرهای ۲- فلوئوروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلالهای مختلف ۲۵۴
شکل(۴- ۱۰). تعادل بین کنفورمرهای ۲- کلروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلالهای مختلف ۲۶۱
شکل (۴- ۱۱). تعادل بین کنفورمرهای ۲- برموسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلالهای مختلف ۲۶۸

فهرست جداول

جدول (۱-۱). مقادیر ΔG^{0}_{298} و K برای استخلافهای مختلف در موقعیت محوری واستوایی..... ۱۳

جدول (۱-۲). اختلاف انرژی آزاد سیکلوهگزانهای یک استخلافی..... ۱۹

جدول (۱-۳). برخی از خواص فیزیکی برخی آلکانهای حلقوی نخستین..... ۲۶

جدول (۱-۴). استریوایزومری در مشتقات سیکلوهگزان..... ۲۹

جدول(۲-۱). انرژی‌هایGibbs از آن واکنش با L ، $w(co)_6 + L \rightarrow w(co)_5 + co$ کئوردینه‌شده در سبکهای مختلف..... ۳۶

جدول (۳-۱). تعریف انواع روشهای شیمی محاسباتی..... ۷۹

جدول (۳-۲). انواع پیوندها در Gaussian..... ۸۴

جدول (۳-۳). انواع کارهای قابل دسترس در Gaussian..... ۸۶

جدول (۴-۱). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالتclose در سطح HF/6-31G*..... ۹۶

جدول (۴-۲). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Close در سطح B3LYP/6-31G*..... ۹۷

جدول (۴-۳). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Close در سطح MP2/6-31G*..... ۹۸

جدول (۴-۴). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Open در سطح HF/6-31G*..... ۹۹

جدول (۴-۵). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Open در سطح B3LYP /6-31G*..... ۱۰۰

جدول (۴-۶). مقادیر ترمودینامیکی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Open در سطح MP2/6-31G*..... ۱۰۱

جدول (۴-۷). مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Close در سطوح HF وB3LYP و MP2 و سری پایه‌ی 6-31G*..... ۱۰۲

جدول (۴- ۸). مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در فاز گاز در حالت Open در سطوح HF وB3LYP و MP2 و سری پایه‌ی 6-31G*..... ۱۰۳

جدول (۴-۹). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت HF در سطحClose..... ۱۰۵

جدول (۴-۱۰). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت HF در سطح Open..... ۱۰۵

جدول(۴-۱۱). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت close در سطح B3LYP..... ۱۰۷

جدول(۴-۱۲). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت Open در سطح B3LYP.....۱۰۷
جدول(۴-۱۳). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت close در سطح MP2.....۱۰۹
جدول(۴-۱۴). درصد کنفورمرهای محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در فاز گازی در حالت Open در سطح MP2.....۱۰۹
جدول(۴-۱۵). فواصل پیوندی(بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکوهگزیلیدین فسفین در فازگاز در حالت Close $MP_2/6-31G^*$.....۱۲۱
جدول(۴-۱۶). فواصل پیوندی(بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکوهگزیلیدین فسفین در فازگاز در حالت open در سطح $MP_2/6-31G^*$.....۱۲۲
جدول (۴-۱۷). مقادیر ترمودینامیکی انرژی های نقطه صفر (E_0) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح HF/6-31G*.....۱۲۶
جدول (۴-۱۸). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{ZPC}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح HF/6-31G*.....۱۲۷
جدول (۴-۱۹). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{tot}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح HF/6-31G*.....۱۲۸
جدول (۴-۲۰). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+H $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح HF/6-31G*.....۱۲۹
جدول (۴-۲۱). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+G $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح HF/6-31G*.....۱۳۰
جدول (۴-۲۲). مقادیر ترمودینامیکی (S $_{total}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب کالری برمول بر کلوین در سطح HF/6-31G*.....۱۳۱
جدول (۴-۲۳). مقادیر ترمودینامیکی ممان دو قطبی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب دبای در سطح HF/6-31G*.....۱۳۲
جدول (۴-۲۴). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال سیکلو هگزان در سطح HF/6-31G*.....۱۳۴
جدول (۴-۲۵). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا کلرید کربن در سطح HF/6-31G*.....۱۴۲
جدول (۴-۲۶). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال کلروفرم در سطح HF/6-31G*.....۱۴۹
جدول (۴-۲۷). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا هیدرو فوران در سطح HF/6-31G*.....۱۵۶

جدول (۴- ۲۸). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال استون در سطح HF/6-31G* ۱۶۳
جدول (۴-۲۹). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال اتانول در سطح HF/6-31G* ۱۷۱
جدول (۴-۳۰). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال متانول در سطح HF/6-31G* ۱۷۸
جدول (۴-۳۱). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال دی متیل سولفوکسید در سطح HF/6-31G* ۱۸۵
جدول (۴-۳۲). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال آب در سطح HF/6-31G* ۱۹۲
جدول (۴-۳۳). مقادیر ترمودینامیکی انرژی های نقطه صفر (E_0) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح B3LYP/6-31G* ۱۹۹
جدول (۴-۳۴). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{ZPC}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح B3LYP/6-31G ۲۰۰
جدول (۴-۳۵). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{tot}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۱
جدول (۴-۳۶). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+H $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۲
جدول (۴-۳۷). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+G $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۳
جدول (۴-۳۸). مقادیر ترمودینامیکی (S $_{total}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب کالری برمول بر کلوین در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۴
جدول (۴-۳۹). مقادیر ترمودینامیکی ممان دو قطبی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب دبای در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۵
جدول (۴-۴۰). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال سیکلو هگزان در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۶
جدول (۴-۴۱). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا کلرید کربن در سطح B3LYP/6-31G* ۲۰۸

جدول (۴-۴۲). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال کلروفرم در سطح B3LYP/6-31G* ۲۱۰
جدول (۴-۴۳). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا هیدرو فوران در سطح B3LYP/6-31G* ۲۱۲
جدول (۴-۴۴). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال استون در سطح B3LYP/6-31G* ۲۱۴
جدول (۴-۴۵). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال اتانول در سطح B3LYP/6-31G* ۲۱۶
جدول (۴-۴۶). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال متانول در سطح B3LYP/6-31G* ۲۱۸
جدول (۴-۴۷). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال دی متیل سولفوکسید در سطح B3LYP/6-31G* ۲۲۰
جدول (۴-۴۸). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال آب در سطح B3LYP/6-31G* ۲۲۲
جدول (۴-۴۹). مقادیر ترمودینامیکی انرژی های نقطه صفر (E_0) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح MP2/6-31G* ۲۲۵
جدول (۴-۵۰). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{ZPC}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح MP2/6-31G* ۲۲۶
جدول (۴ -۵۱). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+E $_{tot}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح MP2/6-31G* ۲۲۷
جدول (۴-۵۲). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+H $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح MP2/6-31G* ۲۲۸
جدول (۴-۵۳). مقادیر ترمودینامیکی (E_0+G $_{corr}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب (Hartree/Particle) در سطح MP2/6-31G* ۲۲۹
جدول (۴ -۵۴). مقادیر ترمودینامیکی (S $_{total}$) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب کالری برمول بر کلوین در سطح MP2/6-31G* ۲۳۰
جدول (۴-۵۵). مقادیر ترمودینامیکی ممان دو قطبی کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F,Cl,Br) در حلال های مختلف بر حسب دبای در سطح ۲۳۱

جدول(۴-۵۶). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال سیکلو هگزان در سطح MP2/6-31G* ۲۳۲
جدول(۴-۵۷). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا کلرید کربن در سطح MP2/6-31G* ۲۳۷
جدول (۴ -۵۸). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال کلروفرم در سطح MP2/6-31G* ۲۳۶
جدول (۴ -۵۹). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال تترا هیدرو فوران در سطح MP2/6-31G* ۲۳۸
جدول(۴-۶۰). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال استون در سطح MP2/6-31G* ۲۴۰
جدول (۴ -۶۱). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال اتانول در سطح MP2/6-31G* ۲۴۲
جدول(۴-۶۲). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال متانول در سطح MP2/6-31G* ۲۴۴
جدول(۴ -۶۳). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال دی متیل سولفوکسید در سطح MP2/6-31G* ۲۴۶
جدول(۴ -۶۴). تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل محوری و استوایی ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین در حلال آب در سطح MP2/6-31G* ۲۴۸
جدول(۴ -۶۵). تغییرات ΔE بر حسب (کیلو کالری بر مول) برای تعادل استوایی به محوری کنفورمرهای ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl ،Br) در حلالهای مختلف در سطوح HF وB3LYP و MP2 و سری پایه‌ی 6-31G* ۲۵۱
جدول (۴-۶۶). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- فلوئوروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح HF/6-31G* ۲۵۵
جدول (۴-۶۷). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- فلوئوروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح B3LYP/6-31G* ۲۵۶
جدول(۴ -۶۸). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- فلوئوروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح MP2/6-31G* ۲۵۷
جدول(۴ -۶۹). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- کلروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح HF/6-31G* ۲۶۲

جدول (۴-۷۰). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- کلروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح B3LYP/6-31G* ۲۶۳
جدول(۴-۷۱). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- کلروسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح MP2/6-31G* ۲۶۴
جدول (۴-۷۲). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- برموسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح HF/6-31G* ۲۶۹
جدول (۴-۷۳). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- برموسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح B3LYP/6-31G* ۲۷۰
جدول(۴ -۷۴). تغییرات ترمودینامیکی تعادل محوری به استوایی کنفورمرهای ۲- برموسیکلو هگزیلیدین فسفین در حلال های مختلف در سطح MP2/6-31G* ۲۷۱
جدول(۴ -۷۵). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال سیکلوهگزان $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۱
جدول(۴-۷۶). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال کربن تتراکلرید در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۲
جدول (۴-۷۷). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) - زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال کلروفوم در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۳
جدول(۴ -۷۸). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال تتراهیدروفوران در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۴
جدول(۴-۷۹). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال استون در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۵
جدول(۴-۸۰). بررسی فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F، Cl، Br) در حلال اتانول در سطح MP2/6-31G* ۲۸۶
جدول(۴-۸۱). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال متانول در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۷
جدول (۴-۸۲). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال دی متیل سولفوکسید در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۸
جدول(۴-۸۳). فواصل پیوندی (بر حسب آنگستروم) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه) کنفورمرهای استوایی و محوری ۲- هالوسیکلوهگزیلیدین فسفین برای هالوژن های (F،Cl،Br)در حلال آب در سطح $MP_2 / 6-31G^*$ ۲۸۹

نمودار ۴-۱- تغییرات ΔE کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۰
نمودار۴-۲- تغییرات ΔEtot کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۰
نمودار۴-۳- تغییرات ΔH کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۱
نمودار۴-۴- تغییرات ΔG کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۱
نمودار ۴-۵- تغییرات ثابت تعادل Keq کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۲
نمودار ۴-۶ تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeدر سطح HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۲
نمودار۴-۷- تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeدر سطوح B3LYPو سری پایه ی *G۳۱-۶ ..... ۱۱۳
نمودار ۴-۸- تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeدر سطوح MP2و سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۳
نمودار ۴-۹- تغییرات طول پیوند C-X کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین محوری و استوایی هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Closeدر سطح MP2و سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۳
نمودار۴-۱۰- تغییرات ΔE کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۳
نمودار ۴-۱۱-تغییرات ΔE_{tot} کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۴
نمودار ۴-۱۲- تغییرات ΔH کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۴
نمودار ۴-۱۳-تغییرات ΔG کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶..... ۱۱۶
نمودار۴-۱۴- تغییرات ثابت تعادل Keq کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openو سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *G۳۱-۶ ..... ۱۱۶

نمودار۴-۱۵- تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openدر سطوح HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۱۷
نمودار ۴-۱۶-تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openدر سطح B3LYPو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۱۷
نمودار ۴-۱۷-تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در فاز گاز و در حالت Openدر سطح MP2و سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۱۸
نمودار۴-۱۸- تغییرات طول پیوند C-X بر حسب (انگستروم) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین محوری و استوایی هالوژنهای F,Cl,Brدر فاز گاز و در حالت Openدر سطح MP2و سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۱۸
نمودار ۴-۱۹-تغییرات ΔE بر حسب (کیلو کالری بر مول) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۶
نمودار ۴-۲۰- تغییرات ΔE_{tot} بر حسب (کیلو کالری بر مول) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۶
نمودار ۴-۲۱- تغییرات ΔH بر حسب (کیلو کالری بر مول) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۷
نمودار۴-۲۲- تغییرات ΔG بر حسب (کیلو کالری بر مول) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۷
نمودار ۴-۲۳- تغییرات K کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۸
نمودار ۴-۲۴- تغییرات ممان دو قطبی بر حسب (دبای) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان در سطوح HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۸
نمودار ۴-۲۵- تغییرات ممان دو قطبی بر حسب (دبای) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان در سطوح B3LYPو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۹
نمودار ۴-۲۶- تغییرات ممان دو قطبی کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژن های F,Cl,Br در حلال سیکلو هگزان در سطوح MP2و سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۳۹
نمودار۴-۲۷- تغییرات طول پیوند C-X بر حسب (آنگستروم) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین محوری و استوایی هالوژنهای F,Cl,Brدر حلال سیکلو هگزان در سطح MP2و سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۴۰
نمودار۴-۲۸- تغییرات ΔE بر حسب (کیلو کالری بر مول) کنفورمرهای ۲- هالو سیکلو هگزیلیدین فسفین هالوژنهای F,Cl,Br در حلال تترا کلرید کربن و سطوح MP2,B3LYP, HFو سری پایه ی *۶-G۳۱..... ۱۴۳