



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد ((M.Sc))

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

تعیین ساختارهای گذار فرآیندهای توتومری پروپیل تیواوراسیل با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتوم

استاد راهنما:

دکتر بهزاد چهکندی

استاد مشاور:

دکتر صفا علی عسگری

نگارش:

زینب خیزاب

تابستان ۱۳۹۰



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

تعیین ساختارهای گذار فرآیندهای توتومری پروپیل تیواوراسیل با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتوم

نگارش:

زینب خیزاب

تابستان ۱۳۹۰

۱. دکتر بهزاد چهکندی

۲. دکتر صفا علی عسگری

۳. دکتر احسان زاهدی

۴. دکتر عبدالحکیم پنق

هیات داوران:

سپاسگزاری

سپاس خدایی را که محبتش التیامی است بر زخم های کهنه و مرحمتش مرهمی است بر دردهایمان که هرچه داریم از اوست. تشکر و قدردانی از همت عالی مخلوق نشانه سپاس به درگاه احدیت است. بدینوسیله با سپاس و قدردانی خالصانه ترین احترامات را به استاد گرانقدر جناب استاد دکتر بهزاد چهکندی که در طول این دوره با صبر و شکیبایی قدم به قدم در تحقیق مطالعه و آموزش مرایاری کردن. و از استاد محترم جناب آقای دکتر صفا علی عسگری استاد مشاور محترم پروژه تشکر و قدردانی می کنم. در پایان از سایر اساتید محترم که در طول دوران تحصیل افتخار شاگردیشان را داشتیم تشکر و قدردانی می کنم

تقدیم به پدر پرمهرو بزرگوارم:

تقدیم به پدر مهربانم که در تمامی لحظات زندگیش ایثارخستگی ناپذیر رابه من آموخت که همه هستی ام از سایه پرمهراوست که حضور گرمی بخش زندگی من است حضورت تا ابد سبز و جاودانه باد .

تقدیم به مادر مهربانم:

تقدیم به مادرم یگانه عشقم روی زمین مادری که تمام لحظات زندگی ام را آکنده از عشق و علاقه به او بوده وهست تقدیم به وجود پرمهرت و قلب مالا مال از عشقت که الفبای زندگی و چگونگی زیستن رابه من آموختی.

تقدیم به همسرم:

باسپاس از تمامی محبتهایش و همراهی هایش تقدیم به او که پشتوانه محکمی برای رفتن تا رسیدن است بی تردید بدون او زندگی محال و پیمودن برایم ناممکن است .

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده
	فصل اول: ترکیبات هتروسیکل ، توتومری شدن
۳	(۱-۱) مقدمه
۴	(۲-۱) ترکیبات هتروسیکل
۴	(۱-۲-۱) هتروسیکل های آروماتیک
۴	(۲-۲-۱) هتروسیکل های غیر آروماتیک
۵	(۳-۱) هتروسیکل های شش اتمی با شش الکترون π
۷	(۴-۱) هتروسیکل های پنج اتمی با شش الکترون π
۸	(۵-۱) بعضی از هتروسیکل های ادغام شده
۹	(۶-۱) فعالیت شیمیایی ترکیبات آروماتیک
۱۳	(۷-۱) ترکیبات حلقوی شش عضوی بایک هترواتم
۱۳	(۸-۱) ترکیبات حلقوی پنج عضوی بایک هترواتم
۱۴	(۱-۸-۱) پیرول ها
۱۴	(۲-۸-۱) فوران ها
۱۵	(۳-۸-۱) تیوفن ها
۱۶	(۴-۸-۱) ایندول ها و ترکیبات وابسته
۱۷	(۹-۱) ترکیبات حلقوی شش عضوی بادوهترواتم یا بیشتر
۱۷	(۱۰-۱) پیریمیدین ها و پورین ها
۲۳	(۱۱-۱) توتومری شدن
۲۳	(۱-۱۱-۱) بررسی فرآیند توتومری
۲۹	(۲-۱۱-۱) نمونه هایی از توتومری شدن

۳۲	(۱-۱۲) توتومری شدن ترکیبات هتروآروماتیک
۳۵	(۱-۱۳) توتومری های پروپیل تیواوراسیل
۳۷	(۱-۱۳-۱) معرفی پروپیل تیواوراسیل و کاربرد آن
۳۷	(۱-۱۳-۲) مکانیسم عمل پروپیل تیواوراسیل
	فصل دوم: مطالعات انجام شده در مورد DNA و توتومراسیون بازهای آلی
۴۰	(۱-۲) مقدمه
۴۱	(۲-۲) مطالعات انجام شده روی DNA
۴۲	(۳-۲) مطالعات انجام شده روی پیریمیدین ها
۴۶	(۴-۲) تحقیقات انجام شده پیرامون توتومریزاسیون بازهای آلی
	فصل سوم: روشهای محاسباتی در شیمی کوانتوم
۵۲	(۱-۳) مقدمه
۵۴	(۲-۳) برنامه گوسین ۲۰۰۳
۵۶	(۳-۳) روش های محاسباتی
۵۶	(۴-۳) چهار روش اصلی برای محاسبه خصوصیات مولکولی وجود دارد
۵۶	(۱-۴-۳) محاسبات نیمه تجربی (sexi-empirical method)
۵۷	(۱-۱-۴-۳) بررسی ها به روش اوربیتال مولکول نیمه تجربی مولکول های مزدوج مسطح
۵۹	(۲-۱-۴-۳) بررسی ها به روش اوربیتال های مولکولی نیمه تجربی مولکول های نامسطح
۶۱	(۲-۴-۳) روش آغازین (ab initio)
۶۲	(۱-۲-۴-۳) تقریب بورن - اپنهایمر
۶۲	(۵-۳) روش میدان خود سازگار ها هارتری - فاک (scf)
۶۵	(۶-۳) روش هارتری - فاک (HF)
۶۵	(۱-۶-۳) در روش حل معاملات هارتری - فاک
۶۶	(۲-۶-۳) روش حل معادلات هارتری - فاک به روش روتان یعنی روش RHF

۶۶	(۷-۳) توابع پایه
۶۷	(۱-۷-۳) توابع اسلیتری
۶۸	(۲-۷-۳) توابع گوسینی
۶۸	(۳-۷-۳) سرهای پایه ی کمینه
۶۹	(۴-۷-۳) سر ی های پایه توسعه یافته
۶۹	(۵-۷-۳) سر های پایه دوتائی - زتا
۶۹	(۶-۷-۳) سری های پایه شکافته ظرفیتی
۷۰	(۷-۷-۳) سری های پایه قطبیده
۷۱	(۸-۷-۳) سری پایه نفوذی
۷۱	(۸-۳) روش های فوق هارتری - فاک (همبستگی الکترون)
۷۳	(۹-۳) تئوری تابع چگالی (DFT)
۷۳	(۱-۹-۳) روش تقریب چگالی عمومی (LDA)
۷۴	(۲-۹-۳) روش های مکانیک مولکولی (MM)
۷۴	(۳-۹-۳) روش های دینامیک مولکولی (MM)
۷۵	(۱۰-۳) مقایسه ی روش های نیمه تجربی و ab initio , محدودیت ها و نقاط قوت
۷۶	(۱۱-۳) معرفی چند محاسبه ab initio
۷۷	(۱۱-۳) شناسایی حالت گذار
۷۷	(۱-۱۱-۳) سطح انرژی پتانسیل (pes) potential –energy surface
۷۹	(۲-۱۱-۳) مشخصه نقاط ایستا
۸۰	(۳-۱۱-۳) کار IRC
۸۱	(۱-۳-۱۱-۳) تعدادی از گزینه ها کلید واژه IRC
۸۲	(۲-۳-۱۱-۳) محاسبه مسیر واکنش IRC
۸۳	(۴-۱۱-۳) شناسایی ساختار حالت گذار

۸۴	(۳-۱۱-۵) خلاصه ای از مراحل شناسایی حالت گذار
	فصل چهارم: محاسبات و نتیجه گیری
۸۶	(۴-۱) مقدمه
۸۶	(۴-۲) ساختار پنج توتومر پروپیل تیواوراسیل
۸۸	(۴-۳) محاسبات و نتایج توابع ترمودینامیکی
۹۵	(۴-۴) محاسبات توابع ترمودینامیکی واکنش های رفت و برگشت PTU
۱۰۵	(۴-۵) نتایج حاصل از بررسی های ترمودینامیکی واکنش رفت و برگشت در فاز گاز و حلال های مختلف
۱۱۶	(۴-۶) محاسبات واکنش رفت و برگشت در فاز گاز به صورت اشکال فضایی IRC
۱۱۸	(۴-۷) نتایج تغییرات توابع ترمودینامیکی واکنش رفت و برگشت پروپیل تیواوراسیل بایک مولکول آب
۱۲۴	(۴-۸) نتیجه گیری نهایی از بررسی حالات گذار توتومری پروپیل تیواوراسیل در فاز گاز و حلال های مختلف
۱۲۴	(۴-۹) نتیجه گیری نهایی از بررسی حالات گذار توتومری پروپیل تیواوراسیل بایک مولکول آب
	منابع و ماخذ
۱۲۶	فرست منابع فارسی
۱۲۷	فرست منابع غیر فارسی
۱۲۹	چکیده انگلیسی

فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۵	شکل (۱-۱)
۵	شکل (۲-۱)
۶	شکل (۳-۱)
۷	شکل (۴-۱)
۷	شکل (۵-۱)
۸	شکل (۶-۱)
۹	شکل (۷-۱)
۱۰	شکل (۸-۱)
۱۲	شکل (۹-۱)
۱۴	شکل (۱۰-۱)
۱۵	شکل (۱۱-۱)
۱۵	شکل (۱۲-۱)
۱۶	شکل (۱۳-۱)
۳۱	شکل (۱۴-۱)
۳۱	شکل (۱۵-۱)
۳۲	شکل (۱۶-۱)
۳۴	شکل (۱۷-۱)
۳۶	شکل (۱۸-۱)
۴۴	شکل (۱-۲)
۴۴	شکل (۲-۲)
۴۵	شکل (۳-۲)

٧٨

شکل (١-٣)

٨٧

شکل (١-٤)

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۱۱	جدول (۱-۱)
۲۱	جدول (۲-۱)
۸۸	جدول (۱-۴)
۹۰	جدول (۲-۴)
۹۱	جدول (۳-۴)
۹۲	جدول (۴-۴)
۹۳	جدول (۵-۴)
۹۴	جدول (۶-۴)
۹۶	جدول (۷-۴)
۹۶	جدول (۸-۴)
۹۷	جدول (۹-۴)
۹۷	جدول (۱۰-۴)
۹۸	جدول (۱۱-۴)
۹۸	جدول (۱۲-۴)
۱۰۰	جدول (۱۳-۴)
۱۰۰	جدول (۱۴-۴)
۱۰۱	جدول (۱۵-۴)
۱۰۱	جدول (۱۶-۴)
۱۰۲	جدول (۱۷-۴)
۱۰۲	جدول (۱۸-۴)

فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۹۹	نمودار (۱-۴)
۱۰۲	نمودار (۲-۴)
۱۰۵	نمودار (۳-۴)

چکیده

پروپیل تیواوراسیل (PTU) یکی از ترکیبات مهم در داروسازی است و مطالعه توتومری آن از نظر زیستی اهمیت دارد، بویژه دارویی برای پرکاری تیروئید است. در این تحقیق حالات گذار تعادلات توتومری مختلف آن مورد بررسی قرار گرفته است. بررسی حالت گذار به منظور جستجو کردن یک حدواسط بین مواد اولیه و محصولات (مرز واقعی بین مواد اولیه و محصولات) است. حالت گذار ماکزیمم نقطه روی منحنی ای است که توسط مختصه واکنش و انرژی توصیف می شود. در این تحقیق حالات گذار پنج واکنش توتومری PTU مورد بررسی قرار گرفته است. پنج توتومر پروپیل تیواوراسیل و واکنش های موجود میان آنها در فاز گازی و حلال های دی متیل سولفوکساید، کلروفرم، استون، کربن تتراکلرید و سیکلوهگزان که ضریب دی الکتریک متفاوتی دارند بررسی شده اند. کلیه محاسبات کوانتومی به روش DFT در سطح و سری پایه $6-31G^*$ در فاز گاز و حلال مورد بررسی قرار گرفت. همچنین با استفاده از محاسبات فرکانس در سطوح مشابه مقادیر خواص ترمودینامیکی از قبیل انرژی فعال سازی (ΔE^\ddagger) و انرژی آزادگیس (ΔG^\ddagger) و انرژی آزادآنتالپی (ΔH^\ddagger) و ثابت سرعت را محاسبه کردیم. کلیه محاسبات با استفاده از نرم افزار گوسین ۰۳ در دمای ۲۹۸/۱۵ کلوین و فشاریک اتمسفر انجام شده است.

نتایج نشان می دهد در فاز گاز و حلال های مختلف در واکنش رفت $ptu2-ts-ptu1$ پایدارترین و در واکنش برگشت $ptu4-ts-ptu5$ پایدارترین واکنش پروپیل تیواوراسیل است.

همچنین فرایندهای توتومری و حالات گذار پروپیل تیواوراسیل را با کمک یک مولکول آب نیز مورد بررسی قرار داده و انرژی آنها با استفاده از محاسبات کوانتومی در سطح B3LYP و سری های پایه $6-31G^*$ و $6-311++G^{**}$ تعیین شده اند. نتایج نشان می دهد که روند تغییرات واکنش رفت و برگشت $ptu2-ts-ptu1$ پایدارترین و واکنش $ptu4-ts-ptu5$ ناپایدارترین مقدار می باشد.

فصل اول:

ترکیبات هتروسیکل

وتوتومری شدن

(۱-۱) مقدمه:

درجهان مادی اطراف ما رفتارهریک از اجزاء و در نهایت رفتار کل جهان توسط نیروهای بین ذرات کنترل می شود.جهان پیوسته در حال تغییر تحول است و انرژی مدام در حال تبدیل به یکدیگرند و از سوی دیگر و از دیدگاه کل نگری جهان دارای پایداری و ثبات خاصی نیز هست لذا این نیرو باید آنقدر قوی باشند تا پایداری سنجی را فراهم کنند اما نه آنقدر قوی که مانع از انجام واکنش ها و به وجود آمدن تغییرات شوند.

یکی از مباحث مهم در علم شیمی توتومری شدن ترکیب شیمیایی و بررسی پایداری توتومری های حاصل از آن است در این فصل بررسی ترکیبات هتروسیکل می پردازیم .

ترکیبات آلی ساختمان گوناگونی دارند و بسیاری از این ساختمانها واجد سیستم حلقوی هستند اگر سیستم حلقوی تشکیل از اتم های کربن و حداقل یک عنصر دیگر باشد این ترکیب به عنوان هتروسیکل طبقه بندی میشود و عناصر دیگری هم وجود دارد که معمولا به همراه کربن در سیستم حلقوی وجوددارند مانند نیتروژن ، اکسیژن ، گوگرد و.... می باشد.حدود نیمی از ترکیبات آلی شناخته شده دارای حداقل یک جزءهتروسیکل هستند.هتروسیکل ها بزرگترین طبقه در ترکیبات آلی هستند در واقع بیشتر ترکیبات طبیعی و داروها دارای حلقه های هتروسیکلی می باشند.

هتروسیکل ها را میتوان به دوزیر گروه تقسیم کرد؛غیرآروماتیک و آروماتیک چند ترکیب هتروسیکل غیرآروماتیک مانند اتیل اکسید و سایر اترهای حلقوی ،استالهای حلقوی،استرهای حلقوی(لاکتون ها)و آمینهای حلقوی از این جمله اند:عموما " این هتروسیکلهای غیر آروماتیک به میزان زیادی مانند مشابه های غیرحلقوی با همان گروه عاملی عمل می کنند اما مهمترین هتروسیکل های آروماتیک هستند.

(۲-۱) ترکیبات هتروسیکل

ترکیبات هتروسیکل ترکیباتی هستند که در ساختار حلقه آنها بیش از یک نوع اتم موجود باشد ترکیبات هتروسیکل سومین و بزرگترین خانواده ترکیبات آلی هستند.

متداولترین هترو اتم موجود در این ترکیبات گوگرد، اکسیژن و نیتروژن هستند.در حقیقت هتروسیکل ترکیبات آلی شامل اتم نیتروژن در موقعیت ۳و۱ هستند. هتروسیکل ها از نظر ساختاری بسیار متنوع هستند کشش حلقه باعث به سهولت باز شدن هتروسیکل ۳و۳ عضوی در مقابل حملات نوکلئوفیلی می شود.

این ترکیبات انواع مختلف دارند. مثلاً پیریدین یک ایمین آروماتیک حلقوی است که دارای یک هترواتم نیتروژن است. هتروسیکل‌های در بسیاری از ترکیبات دارویی مانند آنتی بیوتیک‌ها جزء ترکیبات دارویی هستند گذشته از ترکیبات مفید ترکیبات مفیدی مانند هروئین و مرفین جزء ترکیبات هتروسیکل به شمار می‌روند و برای درمان زخم معده از ترکیبات هتروسیکل استفاده می‌شود.

هتروسیکل‌های سنتزی کاربردهای فراوانی به عنوان علف‌کشها، قارچها، حشره‌کشها، رنگها و فرآوردهای دارویی دارند از جمله ترکیبات هتروسیکل هستند که در طبیعت یافت می‌شوند اسید نو کلیئیک‌ها و کوآنزیم‌ها هستند.

(۱-۲-۱) هتروسیکل‌های آروماتیک

هتروسیکل‌های با حلقه بزرگ‌تر به علت نبودن کشش حلقه بی‌اثرند و نسبت به هتروسیکل‌های کوچک‌تر واکنش پذیری کمتری دارند اما به هرحال وجود هترواتم در این ساختمان میتواند باعث انجام واکنش‌های خاصی شود.

(۱-۲-۲) هتروسیکل‌های غیر آروماتیک

هتروسیکل‌های غیرآروماتیک مشتقاتی از سیکلون هستند هتروسیکل‌های کوچک مانند مشتقات هتروسیکل سیکلوپروپان‌ها یا سیکلوبوتان که هتروسیکل‌های غیرآروماتیک هتروسیکل‌های اشباع شده یا نسبتاً "اشباع شده که امکان جابه‌جایی اکسیژن در حلقه در آنها وجود ندارد.

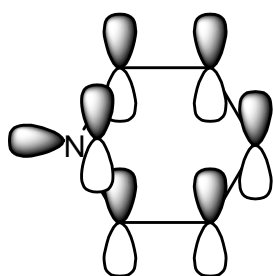
اندازه سیستم حلقوی و شکل کلی مولکول مهمترین عوامل برای تشخیص ترکیبات حلقوی و نا حلقوی می‌باشند. وجود یک سیستم حلقوی باعث ایجاد فشار به روی مولکول می‌شود که این فشار مولکول است در مدل ناحلقوی وجود نداشته باشد. فشار بیشتری به احتمال زیاد باعث ایجاد اختلاف بین سیستم‌های حلقوی و نا حلقوی می‌شود مولکول انعطاف پذیر معمولاً هم آرایشی خود را به صورتی در می‌آورند که تداخلات پیوندی حداکثر و تداخلات ناپیوندی دافع حداقل باشند در این هم آرایشی‌ها زوایا و طول پیوند طبیعی وجود دارد و ترکیبات مختلف اختلاف چندانی نخواهد داشت و استخلاف آرایش ارجع را خواهند داشت.

(۳-۱) هتروسیکل های شش اتمی با شش الکترون π

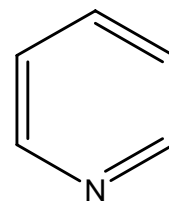
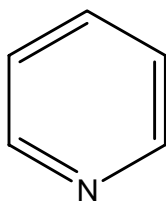
گروههای مهمی از هتروسیکل ها هستند که از نظر ساختمان آنالوگ های بنزن به شمار می آیند اما یک یا بیش از یک اتم کربن از حلقه بنزن توسط هترواتم ها جایگزین شده اند. پیریدین (آزابنزن) نیتروژن در حلقه بهترین نمونه شناخته شده از این ترکیبات است پیریدین بنز مانند بنزن مسطح اما سیستم حلقوی آن اندکی از حالت شش ضلعی منظم خارج شده زیرا طول پیوند کربن-نیتروژن کوتاه تر از کربن-کربن میباشد شکل (۱-۱)

نمایی از ساختمان پیریدین است که نشان دهنده یک ساختمان حلقوی متشکل از پنج کربن با هیبرید sp^2 که به هر کدام یک اتم هیدروژن متصل شده است و یک اتم نیتروژن با هیبرید sp^2 می باشد.

هریک از شش اتم حلقه دارای یک اوربیتال p عمود بر صفحه حلقه می باشند این ساختمان از این جهت که دارای یک حلقه کامل اوربیتال های P شکل حاوی ۶ الکترون می باشد مشابه بنزن و از این جهت که یک جفت الکترون تنها در صفحه حلقه دارد با آن متفاوت است. پیریدین شکل (۲-۱) را بنز می توان مانند بنزن توسط یکی از دو ساختمان معادل ککوله نشان داد.



(1-1)



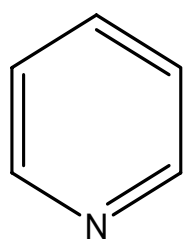
(2-1)

نمایش ساختمان پیریدین

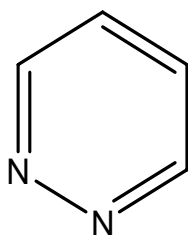
انرژی های این اوربیتال ها منجر به این نتیجه گیری گردید که ۳ عدد از آنها انرژی پایین تری از مجزا و ۳ عدد دیگر انرژی بالاتر دارند. سه اوربیتال پیوندی π که انرژی پایین تر دارند حاوی شش الکترون بوده و اوربیتال های با انرژی بالا یعنی اوربیتال ضد پیوندی π^* خالی می باشد قانون هوکل گر بر پایه محاسبات ساده مولکولی استوار است بیان میکند که مولکولهای مسطحی که حلقه اوربیتال های p متصل دارند هنگامی که دارای $(4n+2)$ الکترون π هستند از نمونه های غیر حلقویشان پایدارترند. (n میتواند صفر یا هر عدد صحیحی باشد) [۱]

بنابراین بنزن، پیریدین و سایر ترکیباتی که شش الکترون π دارند از قانون هوکل با $n=1$ پیروی می کنند این ساختمان های حلقوی شش π الکترونی بیشترین و مهمترین دسته ای هستند که از قانون هوکل پیروی کرده و ما آنها را به عنوان آروماتیک می شناسیم [۲]. اوربیتال های پیریدین از نظر کیفی خیلی شبیه بنزن بوده ولی دو تفاوت مهم دارند اول اینکه اوربیتال های π پیریدین انرژی پایینی از اوربیتال های بنزن دارند چون نیتروژن از کربن الکترون گاتیوتر است، دومین اختلاف اینکه بالاترین اوربیتال مولکول اشغال شده بنزن (HOMOS) است در حالی که اوربیتال های شبیه در پیریدین انرژی های مختلف دارند.

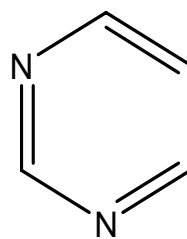
پیریدین تنها هتروسیکل واجد نیتروژن نیست که آنالوگ بنزن به شمار می رود هشت ساختمان هتروسیکلی (شامل پیریدین) شناخته شده اند که دارای یک یا بیش از یک اتم نیتروژن با هیبرید sp^2 در حلقه می باشند این ساختمان در شکل (۱-۳) نشان داده شده اند. انرژی HOMO این آزین های تک حلقه ای به طور پیوسته با افزایش تعداد نیتروژن های حلقه کاهش می یابد و همچنین انرژی LUMO نیز کم می شوند در نتیجه اختلاف انرژی های HOMO - LUMO در طول دوره تقریباً ثابت باقی می ماند.



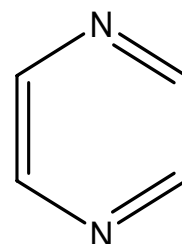
پیریدین



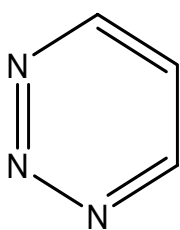
پیریدازین



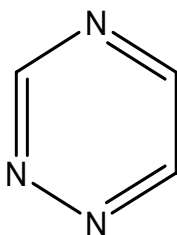
پیریمیدین



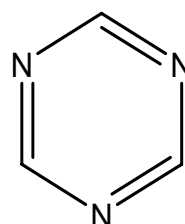
پیرازین



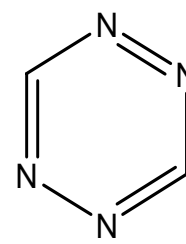
۱ و ۲ و ۳-تری آزین



۱ و ۲ و ۴-تری آزین



۱ و ۳ و ۵-تری آزین



۱ و ۲ و ۴ و ۵-تترازین

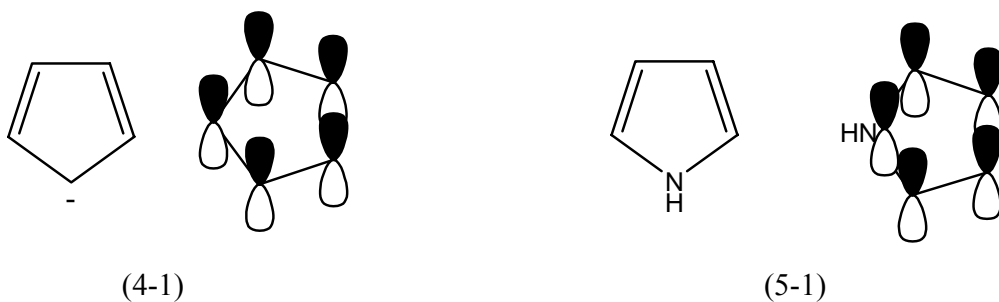
شکل (۱-۳) مشتقات آزا شناخته شده بنزن

(۱-۴) هتروسیکل های پنج اتمی با شش الکترون π

هتروسیکل های اشباع شده مسطح را که واجد پنج اتم باشد می توان یک سیستم آروماتیک در نظر گرفت به شرط اینکه دارای یک حلقه نامتقطع از اوربیتال های P باشش الکترون می باشد آنالوگ حلقوی کربنی این هتروسیکل ها آنیون سیکلوپنتادی ان است این

ترکیب یک پنج ضلعی متقارن مسطح است که دارای پنج اتم کربن با هیبرید SP^2 و حلقه ای از اوربیتال های P دارای شش الکترون می باشد شکل (۴-۱) پیرول رابه عنوان نمونه ای از هتروسیکل های پنج عضوی آروماتیک در نظر می گیریم پیرول یک مولکول مسطح است که در آن نیتروژن هیبرید SP^2 دارد سه پیوند سیگمای متصل به نیتروژن در صفحه مولکول قرار دارند و اوربیتال P که عمود بر صفحه است دارای جفت الکترون های تنهای باقیمانده است این اوربیتال P نیتروژن با چهار اوربیتال P اتم های کربن تداخل کرده و منجر به ایجاد یک سیستم حلقوی الکترون π می شود که متشکل از پنج اوربیتال P است اما جمعاً شش الکترون دارد.

شکل (۵-۱)



ارائه ساختمان آنیون سیکلو پنتادی ان شکل (۴-۱) پیرول شکل (۵-۱)

سایر هتروسیکل های آروماتیک خنثی را می توان توسط یک یا بیشتر از یک گروه CH باقی مانده این هتروسیکل هابانیتروژن ساخت مثال هتروسیکل های پنج عضوی که بیش از یک هترواتم دارند. شکل (۶-۱) نشان داده است تمامی این سیستم های حلقوی را می توان آروماتیک به شمار آورد اما به دلیل اثر نیتروژن اضافی این ترکیبات به اندازه پیرول غنی از الکترون نیستند.

مثال از هتروسیکل های پنج عضوی آروماتیک بادویابیش ازدوهترواتم